

# Simulations Eléments Finis des interactions hydrogène-plasticité sous chargements complexes

Y. CHARLES<sup>a</sup>, M. GASPERINI<sup>b</sup>, T.H. NGUYEN<sup>c</sup>, K. ARDON<sup>d</sup>

a.b.c.d. Université Paris 13, LSPM, CNRS, 99 av. JB Clément, 93430 Villetaneuse, France

a. [yann.charles@univ-paris13.fr](mailto:yann.charles@univ-paris13.fr)

b. [gasperini@univ-paris13.fr](mailto:gasperini@univ-paris13.fr)

c. [hung49xf86@yahoo.com](mailto:hung49xf86@yahoo.com)

d. [kevin.ardon@orange.fr](mailto:kevin.ardon@orange.fr)

## Résumé :

*La fragilisation par l'hydrogène constitue un risque grave de défaillance prématurée des structures métalliques, en particulier pour les applications de stockage et de transport de l'hydrogène. Dans le domaine de la mise en forme, des essais spécifiques comme l'essai de disque [1] sous pression d'hydrogène gazeux ou l'essai de pliage en U après chargement cathodique [2, 3] sont utilisés pour caractériser l'influence de l'hydrogène sur la rupture macroscopique des tôles métalliques. Cependant, l'amorçage d'une fissure de fragilisation dépend à la fois de l'état de contrainte local et de l'évolution de la distribution de l'hydrogène dans le matériau au cours de l'essai, qui résulte d'interactions complexes entre l'hydrogène et la microstructure, pendant ou après de grandes déformations plastiques. La simulation numérique par éléments finis de ces essais permet d'estimer les champs mécaniques et les concentrations d'hydrogène, en vue de prévoir la fiabilité des structures, dès lors que les couplages mécanique-environnement pertinents sont pris en compte.*

*Des procédures numériques ont été développées pour résoudre simultanément dans le code Abaqus© les problèmes aux limites mécanique et de diffusion-piégeage de l'hydrogène [4]. Le modèle prend en compte la diffusion assistée par le champ de contrainte hydrostatique et le piégeage de l'hydrogène par la déformation plastique, à l'équilibre thermodynamique [5], ou en tenant compte du piégeage transitoire [6]. Le modèle peut être appliqué en élastoplasticité isotrope standard ou en élastoplasticité cristalline [7].*

*Des résultats de simulations 2D, axisymétrique et 3D sont présentés dans le cas du fer ou d'aciers bas carbone, avec des lois d'écrouissage identifiées sur des essais de traction simple et des paramètres liés à l'hydrogène issus de la littérature [8, 9]. Ils montrent l'influence des conditions aux limites, des vitesses de sollicitation et de la déformation plastique sur l'évolution du front de diffusion apparent de l'hydrogène dans le matériau. De plus, des simulations sur agrégats polycristallins 3D, situés dans la zone d'intérêt pour la rupture, permettent de mettre en évidence l'effet de l'anisotropie cristalline sur les champs mécaniques et les conséquences sur la distribution d'hydrogène. L'analyse statistique des résultats permet de suggérer des pistes de critères d'initiation de la rupture induite par l'hydrogène à l'échelle du composant.*

## Abstract :

*Hydrogen embrittlement is a serious risk of premature failure of metal structures, particularly for hydrogen storage and transport applications. In the field sheet metal forming, specific tests such as the disk pressure test [1] under hydrogen gas pressure or the U-bend test after cathodic charging [2, 3] are used to characterize the influence of hydrogen on the macroscopic rupture of metal sheets. However, crack initiation due to hydrogen embrittlement depends both on the local stress state and on the evolution of the distribution of hydrogen in the material during the test, which results from complex interactions between hydrogen and microstructure, during or after large plastic deformations. Finite element numerical simulations of these tests permit to estimate the mechanical fields and the hydrogen concentrations, in order to precise the embrittlement risk, as long as the relevant mechanical-environmental coupling is taken into account.*

*Numerical procedures have been developed to solve simultaneously in Abaqus© code the mechanical and hydrogen transport problems [4]. The model accounts for hydrostatic stress-assisted diffusion and hydrogen trapping by plastic deformation at thermodynamic equilibrium [5], or taking into account transient trapping [6]. The model can be applied in standard isotropic elastoplasticity or in crystalline elastoplasticity [7].*

*Results of 2D, axisymmetric and 3D simulations are presented in the case of iron or low-carbon steels, with hardening laws identified on simple tensile tests and with hydrogen related parameters from literature [8, 9]. They show the influence of boundary conditions, of loading rates and of plastic deformation on the evolution of the apparent diffusion front of hydrogen in the material. In addition, simulations on 3D polycrystalline aggregates, located in the area of interest for fracture, highlight the effect of crystalline anisotropy on the mechanical fields and the consequences on hydrogen distribution. The statistical analysis of the results permits to suggest potential criteria for the initiation of the hydrogen embrittlement at the component scale.*

**Mots clefs : hydrogène, plasticité, éléments finis, diffusion-piégeage**

## Références

- [1] Y. Charles, M. Gaspérini, J. Disashi, P. Jouinot, 2012, Numerical modelling of the Disk Pressure Test up to failure under gaseous hydrogen, *Journal of Materials Processing Technology* 212 (2012) 1761-1770.
- [2] S. Takagi, Y. Toji, M. Yoshino, K. Hasegawa, Hydrogen Embrittlement Resistance Evaluation of Ultra High Strength Steel Sheets for Automobiles, *ISIJ International* 52, 2, (2012) 316-322.
- [3] Y. Charles, M. Gaspérini, K. Ardon, S. Ayadi, S. Benannoune, J. Mougénot, Adaptation of hydrogen transport models at the polycrystal scale and application to the U-bend test, *Procedia Structural Integrity* 13 (2018) 896-901.
- [4] Y. Charles, H.T. Nguyen, M. Gaspérini, FE simulation of the influence of plastic strain on hydrogen distribution during an U-bend test, *International Journal of Mechanical Sciences* 120 (2017) 214-224.
- [5] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, A. Bakker, Hydrogen transport near a blunting crack tip, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47, 4 (1999) 971-992.
- [6] S. Benannoune, Y. Charles, J. Mougénot, M. Gaspérini, Numerical simulation of the transient hydrogen trapping process using an analytical approximation of the McNabb and Foster equation, *International Journal of Hydrogen Energy* 43, 18 (2018) 9083-9093.

- [7] Y. Charles, H.T. Nguyen, M. Gaspérini, Comparison of hydrogen transport through pre-deformed synthetic polycrystals and homogeneous samples by finite element analysis, *International Journal of Hydrogen Energy* 42, 31, (2017) 20336-20350.
- [8] P. Sofronis, R.M. McMeeking, Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 37 (1989) 317-350.
- [9] A. Turnbull, R.B. Hutchings, D.H. Ferriss, Modelling of thermal desorption of hydrogen from metals, *Materials Science and Engineering A* 238 (1997) 317-328.