

N° d'ordre :

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de L'enseignement Supérieur et de La Recherche Scientifique

المركز الجامعي بلحاج بوشعيب عين تموشنت

Centre Universitaire Belhadj Bouchaib-Ain Témouchent



Institut de Technologie
Departement de Genie Mécanique
Laboratoire des Structures Intelligentes



THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de **DOCTORAT 3^{eme} Cycle**

Domaine : Sciences et Technologie

Filière : Génie mécanique

Spécialité : Génie mécanique

Par : OURRAD SOUMIA

Intitulé de la thèse

Effet de l'hydrogène sur le comportement mécanique des aciers à moyenne et haute résistance utilisé dans le transport et le stockage de l'hydrogène sous pression : Prise en compte de la variabilité spatiale de la diffusion de l'hydrogène dans la fragilisation de ces aciers

Soutenue publiquement, le / / , devant le jury composé de :

M. Nehari Driss	Pr	Président	Centre Universitaire BELHADJ Bouchaib/ Ain Témouchent.
M. Boutaous Ahmed	Pr	Examineur	Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf - Oran
M. Benzaama Habib	Pr	Examineur	ENP-Maurice Audin Oran
M. Ziadi Abdelkader	Pr	Directeur de thèse	Centre Universitaire BELHADJ Bouchaib/ Ain Témouchent.
M. Houmadi Youcef	Pr	Co-Directeur	Centre Universitaire BELHADJ Bouchaib/ Ain Témouchent.

Année Universitaire : 2019/2020

Remerciement

Ce travail a été effectué dans le cadre d'une collaboration entre le centre universitaire Belhadj Bouchaib et le laboratoire de l'université d'Oviedo (Espagne) sous l'encadrement du Professeur Javier Belzunce

Je voudrais avant tout remercier le ministère de l'enseignement supérieur et la recherche

Je remercie messieurs, Abdelkader ZIADI, Youcef HOUMADI, Sidi Mohammed AISSA MAMOUNE: leur sympathie, leur fabuleux encadrement de ce travail,

Le dévouement de chacun dans ce projet m'a permis de construire un travail dit « de qualité ». Vos expériences m'ont ouvert la voie vers une nouvelle carrière.

Je remercie l'ensemble des membres du jury pour avoir accepté de juger ce travail: Professeur NEHARI Driss, Professeur BOUTAOUS Ahmed, Professeur BENZAAMA Habib ;

Mon amitié va également à tous mes collègues doctorants et amis qui ont mis l'ambiance et partagé avec moi des moments plus qu'agréables en particulier: Chérifi Nor el houda ,

Bien évidemment le soutien de ma famille était toujours là, mes parents qui ont toujours cru en moi, ma sœur OURRAD Farah pour son précieux soutien. Je voudrais leurs exprimer ma reconnaissance et mon affection,

Enfin, je tiens à remercier ma mère OURRAD Hafida pour tout mais vraiment tout, sans elle je ne serais jamais arrivé là aujourd'hui, je te dois tout,

Finalement, je souhaite remercier mon cher mari ZIANI Riyadh qui m'a encouragé et aider pendant cette période.

A mes enfants, Israe et Mohammed

Résumé

La fragilisation par l'hydrogène est un processus physico-chimique-métallurgique dans lequel se développent des phénomènes d'interaction et de diffusion chimiques. Ce phénomène demeure toujours d'actualité vu que plusieurs méthodes stochastiques basées sur des modèles mathématiques complexes n'ont pas pu lever le voile sur la complexité du phénomène. L'objectif du présent travail est d'analyser le comportement en présence d'hydrogène des aciers en procédant à une analyse numérique du phénomène de fragilisation par hydrogène des aciers utilisés dans le stockage de l'hydrogène ou dans le domaine de la construction.

Cette thèse est divisée en deux parties principales. La première utilise une approche probabiliste basée sur la méthode de Monté Carlo appliquée sur un acier à haute résistance C-Mn. Cet acier est utilisé dans le domaine du génie civil et est caractérisé par sa fragilité face à l'hydrogène lors de son élaboration par tréfilage.

La méthode de simulation par Monte Carlo se base sur la seconde loi de diffusion et introduit le caractère aléatoire des paramètres qui régissent la désorption de l'hydrogène en les modélisant en champs aléatoires afin de déterminer une durée optimum pour l'échappement de celui-ci afin de réduire l'effet nocif de l'hydrogène sur l'usage de ces matériaux .

La seconde partie fait appel à l'analyse par les réseaux de neurones artificiels (RNA) imitant le fonctionnement du cerveau humain. Cette méthode connaît un fort regain d'intérêt donnant des résultats satisfaisant grâce à la puissance de la masse de données (big data) en se basant sur des résultats expérimentaux qui portent sur l'étude de la susceptibilité l'acier 42CrMo4 (AISI4140) à l'hydrogène.

Cet acier a été trempé et revenu à différentes températures l'application de réseaux de neurones artificiels est proposée pour prédire la température optimale de revenu afin de contenir une quantité minimale d'hydrogène dans un métal en analysant le paramètre de concentration en hydrogène qui s'échappe par désorption à travers le temps à la température ambiante.

Abstract

Steelmakers have always faced the problem of embrittlement of steels by hydrogen for this, several methods based on complex mathematical models could not lift the veil on the complexity of the phenomenon for that the objective of this work aims to use simple effective and rigorous methods.

This thesis is augmented by two main parts, the first covets a probabilistic approach applied to a high-strength steel C-Mn it is steel used in the field of civil engineering which displayed a certain vulnerability to hydrogen during the development of the latter in the drawing operation stage. The Monte Carlo simulation method is based on the second diffusion law and introduces the random nature of the parameters which govern the hydrogen desorption by modeling them in random fields in order to determine an optimum duration for its escape. in order to reduce the harmful effect of hydrogen on the use of this material.

The second part uses analysis by artificial neural networks (ARN) mimicking the functioning of the human brain. This method is experiencing a strong revival of interest giving satisfactory results thanks to the power of the mass of data (big data).

Based on experimental results which relate to the study of the susceptibility of 42CrMo4 (AISI4140) steel to hydrogen, this steel has been deceived and returned to different temperatures the application of artificial neural networks is proposed to predict the optimal tempering temperature in order to contain a minimum quantity of hydrogen in a metal by analyzing the parameter of hydrogen concentration which escapes by desorption over time at room temperature

ملخص

واجهت شركات صناعة الصلب دائماً مشكلة تقشر الفولاذ بواسطة الهيدروجين من أجل هذا ، فهناك عدة طرق تعتمد على نماذج رياضية معقدة لا يمكنها رفع الحجاب عن تعقيد هذه الظاهرة من أجل أن الهدف من هذا العمل يهدف لاستخدام أساليب بسيطة وفعالة بسيطة. يتم تعزيز هذه الأطروحة من خلال جزأين رئيسيين ، الأول يطمح نهج احتمالي ينطبق على الصلب عالية القوة C-Mn وهو الصلب المستخدمة في مجال الهندسة المدنية والتي أظهرت قابلية معينة للهيدروجين خلال تطوير الأخير في مرحلة عملية الرسم. تعتمد طريقة محاكاة مونت كارلو على قانون الانتشار الثاني وتقدم الطبيعة العشوائية للمعلمات التي تحكم امتصاص الهيدروجين من خلال وضع نماذج لها في حقول عشوائية من أجل تحديد المدة المتلى لهروبها. من أجل الحد من التأثير الضار للهيدروجين على استخدام هذه المواد. يستخدم الجزء الثاني التحليل بواسطة الشبكات العصبية الاصطناعية (ARN) الذي يحاكي عمل الدماغ البشري ، حيث تشهد هذه الطريقة إحياء قوياً للاهتمام ، مما يعطي نتائج مرضية بفضل قوة كتلة البيانات (البيانات الكبيرة). بناءً على النتائج التجريبية التي تتعلق بدراسة قابلية الصلب (42CrMo4 (AISI4140 للهيدروجين ، تم خداع هذا الفولاذ وعاد إلى درجات حرارة مختلفة ، تم اقتراح تطبيق الشبكات العصبية الاصطناعية للتنبؤ درجة حرارة التخفيف المثالية من أجل احتواء الحد الأدنى من كمية الهيدروجين في المعدن عن طريق تحليل معامل تركيز الهيدروجين الذي يهرب عن طريق الامتصاص مع مرور الوقت في درجة حرارة الغرفة

Tables des matières

Résumé.....	I
Abstract	II
ملخص.....	III
Tables des matières	IV
Liste des Abréviations.....	VIII
Liste des figures.....	X
Liste des tableaux	XII
INTRODUCTION GÉNÉRALE	XIII
Objectif de recherche.....	7
CHAPITRE I : REVUE BIBLIOGRAPHIQUE	10
I.1. Interactions Hydrogène-Métal: revue bibliographique	11
I.2. Hydrogène et mécanismes de FPH	12
I.3. Différents modèles de FPH.....	12
1.3.1. Modèle de diminution de l'énergie de cohésion des interfaces.....	14
1.3.2. Modèle de plasticité.....	15
1.3.3. Modèle associé à la formation de lacunes	16
1.3.4. Modèle associé à l'affaiblissement des liaisons interatomiques en pointe de fissure .	17
1.3.5. Modèle de rupture différée.....	17
I.4. Théorie de la pression : Cas des fortes activités d'hydrogène	17
I.5. Hydrogène et défauts : diffusion et piégeage	18
1.5.1. La littérature offre plus de connaissances sur le piégeage et transport par dislocation	19
I.6. Origine et état de l'hydrogène dans un métal.....	21
I.7. Diffusion de l'hydrogène	21
1.7.1. Diffusion en présence de pièges	22
I.8. Solubilité de l'hydrogène	24
I.9. Perméabilité de l'hydrogène	25
I.10. Modes de piégeage de l'hydrogène.....	25
1.10.1. Influence du piégeage	28
1.10.2. Diffusion effective	28
1.10.3. Piège réversible	29
1.10.4. Piège irréversible.....	30
I.11. Particularité et usage du Cr-Mo	30
I.12. Pourquoi ces éléments d'alliage Cr-Mo-V	31

1.12.1.	Influence des éléments d'alliage:	31
1.12.1.1.	Chrome:	31
1.12.1.2.	Molybdène	32
1.12.1.3.	Vanadium	32
1.12.1.4.	Addition de pièges.....	32
I.13.	Effet sur les propriétés mécaniques.....	34
1.13.1.	Essai de rupture de disques sous pression.....	36
1.13.2.	Effet d'un état de contrainte/déformation	37
1.13.3.	Essais de traction.....	38
1.13.4.	Essais de mécanique de la rupture.....	39
1.13.4.1.	Mécanique élastique linéaire de la rupture	39
1.13.4.2.	La méthode à charge constante	39
1.13.4.3.	La méthode à ouverture constante.....	40
1.13.4.4.	La méthode sous chargement croissant.....	40
1.13.5.	Coefficient de diffusion	40
I.14.	Synthèse	42
	Références bibliographique	43
CHAPITRE II : APPLICATION DES METHODES STOCHASTIQUES AU PHENOMENE DE DIFFUSION DE L'HYDROGENE		48
II.1.	Analyse probabiliste de la désorption de l'hydrogène par la méthode de Monte Carlo	49
II.1.1.	Introduction.....	49
II.1.3.	Analyse stochastique en éléments finis	51
II.1.4.	Incertitudes liées à l'imperfection des modèles rhéologiques	51
II.2.	Approche probabiliste.....	51
II.2.1.	Principe général.....	51
II.2.2.	Principales étapes de l'approche probabiliste	52
II.2.3.	Modélisation des données aléatoires	52
II.2.4.	Choix du modèle et incertitudes associées	53
II.2.5.	Calculs probabilistes.....	53
II.2.6.	Exploitation des résultats	53
II.3.	Discretisation de l'aléa en champs aléatoires	54
II.4.	Fiabilité en génie mécanique	55
II.5.	Définitions et enjeux du calcul en fiabilité	55
II.5.1.	Nature du problème et définitions.....	55
II.5.1.1.	Probabilité de rupture (ruine)	56
II.6.	Les Réseaux de Neurones Artificielles.....	58

II.6.1. Introduction.....	58
II.6.2. Réseaux de neurones : définitions et propriétés	58
II.6.3. Neurone biologique.....	59
II.6.4. Application des réseaux de neurones en ingénierie	60
II.6.4.1. Reconnaissance de forme : la lecture automatique des codes postaux.....	60
II.6.4.2. Application des réseaux de neurones en génie mécanique.....	62
II.6.4.5. Neurone formel.....	63
II.6.4.6. Réseaux de neurones formels	64
II.6.4.7. Typologies (Types de réseaux de neurones)	64
II.7. Soft computing techniques.....	67
1 %.....	68
II.7.1. Contrôle non-destructif : la détection de défauts dans des rails.....	68
II.7.2. Prédiction de la température du liquidus du verre.....	68
II.7.3. Pilotage automatique d'un véhicule autonome.....	69
II.7.4. Types d'apprentissage	70
II.7.5. Neurone Artificiel	71
II.7.5.1. Structure.....	71
II.7.5.2. Comportement.....	72
II.7.5.3. Entrées, xi.....	72
II.7.5.4. Seuil, u.....	72
II.7.5.5. Fonction d'activation.....	73
II.7.5.6. Sortie du neurone, y.....	73
II.7.5.7. Rétro-propagation.....	74
II.7.5.8. Réseau de neurone monocouche : le perceptron.....	74
II.7.5.9. Perceptron multicouche {0;1}.....	77
II.7.6. Architecture des réseaux.....	77
Références Bibliographique	79
CHAPITRE III : SIMULATION DE LA DESORPTION DE L'HYDROGENE	83
III.1. Formulation mathématique de la diffusion de l'hydrogène.....	84
III.1.1. Introduction.....	84
III.1.2. Approche théorique de la diffusion	84
III.1.3. Conclusion :	90
III.2. Analyse probabiliste de la désorption de l'hydrogène par la méthode de Monte Carlo.....	91
III.2.1. Introduction	91
III.2.2. Analyse déterministe	93
III.2.3. Modèle mathématique	94

III.2.4. Analyse probabiliste	95
III.2.4.1. Expansion karhnuen-loeve (K-L).....	96
III.2.5. Résultats et discussion.....	98
III.2.5.1. Influence des distances d'autocorrélation	98
III.2.5.2. Etude de la variabilité spatiale et temporelle des distances d'autocorrélation.....	101
III.2.5.3. Optimisation du temps de calcul.....	103
III.2.5.4. Etude paramétrique	106
III.2.6. Conclusion.....	109
Références bibliographique	112
CHAPITRE IV : Etude De La Susceptibilité De L'acier 42CrMo4 à L'hydrogène	113
IV.1. Introduction	114
IV.2. Méthodologie	115
IV.2.1. Composition chimique du matériau.....	115
IV.2.2. Microscopie électronique à balayage	115
IV.2.3. Chargement des éprouvettes par l'hydrogène	116
IV.2.4. Transport des échantillons.....	117
IV.2.5. Mesure de la teneur en hydrogène	118
IV.2.6. Courbes de désorptions de l'hydrogène.....	119
IV.2.7. Microstructures de l'acier utilisé	120
IV.3. Conclusion.....	122
CHAPITRE V : ANALYSE DE L'EFFET DE LA TEMPERATURE DE REVENU SUR LE TEMPS ET LA CONCENTRATION DE DESORPTION DE L'HYDROGENE PAR LES RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS.....	125
V.1. Introduction	126
V.2. Méthodologie.....	127
V.2.1. Analyse statistique par régression linéaire multiple (MLR).....	129
V.2.2. Préparation des ensembles de données de formation, de validation et de test.....	131
V.2.3. Prétraitement des données pour ANN	134
V.3. Résultats	136
V.4. Discussion.....	140
V.5. Conclusion.....	141
Referenes biliographique	143
CONCLUSION GENERALE	145
ANNEXES	148
Annexe A	149
Annexe B.....	152

Liste des Abréviations

Symboles Romains

C_{∞}	La concentration de l'hydrogène
D_e	Le coefficient de diffusion effectif
Z	La striction
COV	Le coefficient de variation
MCS	Simulation de Monte Carlo
RNA	Réseaux de neurones artificiels
y_i	Une sortie d'ANN correspondante
D	Coefficient de diffusion
C_{hyd}	Concentration en hydrogène
t	Temps
x	La distance selon la direction de la diffusion
ΔG_p	Energie de piégeage
N_r	Densité de sites interstitiels
N_p	Densité de piège
c.c.	Cubique centré
c.f.c	Cubique face centré
C_L	La concentration d'hydrogène placé sur les sites interstitiels la probabilité P_{LT} de saut entre un site L et un site T
D_{app}	Coefficient de diffusion apparent,
FPH	Fragilisation par l'hydrogène
KL	Karhunen-Loeve
F	Le coefficient de sécurité
R	Résistance à la rupture
S	Sollicitation appliquée
Pf	Probability of failure
G(X)	Fonction de performance
L_x	La distance d'autocorrélation horizontale
L_y	La distance d'autocorrélation verticale
SORM	Méthode de fiabilité du second ordre
FORM	Méthode de fiabilité du premier ordre
$\xi_i(\theta)$	Variable aléatoire non corrélée
θ	Le caractère aléatoire du montant correspondant
X	Coordonnées spatiales dans l'espace physique
M	L'ordre d'expansion

N_s	Nombre de simulations
T	La température de revenu
R^2	Coefficient de corrélation
y	Sortie calculée par le RNA
h	Somme pondérée des entrées du neurone de la couche de sortie
f	Fonction d'activation
d	La sortie désirée
x_i	Variable d'entrée de la composante i
E	L'erreur quadratique moyenne
Y	Variable dépendante (expliquée)
X_1, \dots, X_n	Variable indépendante (prédite)
A_0, \dots, A_n	Paramètres du modèle estimés à l'aide de la méthode des moindres carrés;
MLP	Le perceptron multicouche
O_i	Les valeurs réelles ou la cible par ANN
P_i	Les valeurs prédites par ANN.
N	Représente le nombre global de données
X	Représente les inputs

Symboles Grecs

β	L'indice de fiabilité
J	Le flux diffusif d'atomes d'hydrogène
∇	L'opérateur de gradient
ε	Résidus

Liste des figures

Chapitre I :

<i>Figure I. 1 formation de cloques dans un acier pur. L'hydrogène est pré-chargé pendant 1h avec une densité de courant 500 A m^{-2} avec de l'arsenic-poison d'électrolytes (Pérez Escobar et al, 2011)....</i>	13
<i>Figure I. 2 Concentration relative en fonction de la distance de pénétration dans un échantillon de nickel durant l'essai de traction déformé lors de l'exposition à l'hydrogène, comparé au profil prédit pour la diffusion uniquement (Louthan et al, 1972).</i>	20
<i>Figure I. 3 Profil de l'activité du tritium et de la contrainte appliquée en fonction du temps (Chêne 1999).....</i>	21
<i>Figure I. 4 Représentation des niveaux d'énergie associés à un site interstitiel et à un site de piégeage avec ΔE_L : l'énergie d'activation de la diffusion, ΔE_T : l'énergie de piégeage et ΔE_{TL} : l'énergie totale du piège (Frappart 2011a, Oudriss 2012).</i>	26
<i>Figure I. 5 Influence de la teneur en hydrogène sur le taux de réduction de striction pour différents aciers à 2,25Cr. Influence favorable d'un ajout de 0,25 %V [Brass, 1983].....</i>	33
<i>Figure I. 6 Comparaison des teneurs en hydrogène piégées irréversiblement à différentes températures pour différents aciers au Cr-Mo [Bocquet P.1995].</i>	34
<i>Figure I. 7 Evolution du coefficient de diffusion en fonction de la limite d'élasticité et de la contrainte maximale dans le cas d'aciers bas carbone ou faiblement alliés Faible cycle de fatigue (Luppo91, Parvathavarthini99, Mendez02, Brass04, Dietzel06, Lunarska08, Dong09).</i>	41

Chapitre II :

<i>Figure II. 1 Schéma général de calcul par un modèle de type probabiliste.....</i>	52
<i>Figure II. 2 Distribution des probabilités de S et de R [Houmadi,2011]</i>	57
<i>Figure II. 3 comparaison entre la courbe de la valeur RMS mesurée et la courbe d'apprentissage du réseau de neurones (Debbah et al, 2015).....</i>	62
<i>Figure II. 4 Exemple d'un réseau de neurones avec une structure en couches (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).....</i>	65
<i>Figure II. 5 Exemple d'un réseau de neurones récurrent (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).</i>	65
<i>Figure II. 6 Exemple d'un réseau de neurones en couches avec une récurrence entre couches (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).....</i>	65
<i>Figure II. 7 Typologies des RNA (Sorin et al, 2001).....</i>	66
<i>Figure II. 8 Perceptron non récurrent ou feed-forward à une sortie</i>	75
<i>Figure II. 9 Gradient de l'erreur totale.</i>	76
<i>Figure II. 10 Schéma représentatif du perceptron multicouche (Mamoune 2011)</i>	77
<i>Figure II. 11 Architecture du réseau de neurone (Mamoune 2011).....</i>	78

Chapitre III

<i>Figure III. 1 Tracé du coefficient de diffusion en fonction de la température réciproque [Brandes et Al, 1992].....</i>	88
---	----

Figure III. 2 Courbe de tendance reliant la striction à la concentration	90
Figure III. 3 Modèle de discrétisation dimensionnelle.....	97
Figure III. 4 Effet des distances d'autocorrélation (L_x et L_y) sur la probabilité de défaillance dans le cas d'un champ aléatoire isotrope.....	99
Figure III. 5 Effet de la distance d'autocorrélation horizontale sur la probabilité de défaillance pour différentes valeurs de L_x	100
Figure III. 6 Effet de la distance d'autocorrélation verticale sur la probabilité de défaillance.	100
Figure III. 7 Évolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différentes positions de L_x	102
Figure III. 8 Évolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différentes positions de L_y	103
Figure III. 9 Optimisation du temps de calcul par le nombre de simulations en fonction du temps... ..	104
Figure III. 10 Évolution temporelle du Pf en fonction du nombre de simulations	105
Figure III. 11 Niveau de probabilités estimé dans différentes branches industrielles (Lemair 2009).106	
Figure III. 12 Evolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différents COV (De) ...	107
Figure III. 13 Zoom sur l'intervalle de temps de 35 à 62 heures en cas de Pf en fonction du temps..	108
Figure III. 14 Évolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différents COV (C_∞) ..	108
Figure III. 15 Zoom sur l'intervalle de temps de (48-60) heures en cas de Pf en fonction du temps..	109

Chapitre IV :

Figure IV. 1 MEB Equipement du microscope à balayage électronique JEOL-JSM5600.....	116
Figure IV. 2 Eprouvette de traction (à gauche) et de rupture (au centre) fraîchement extraits de l'azote liquide et conteneur utilisé pour le transport (à droite).....	118
Figure IV. 3 Analyseur d'hydrogène LECO DH-603 utilisé pour mesurer la teneur en hydrogène ...	119
Figure IV. 4 Courbes de désorption de l'hydrogène, $T_5=700^\circ\text{C}$, $T_4=650^\circ\text{C}$, $T_3=600^\circ\text{C}$, $T_2=550^\circ\text{C}$, $T_1=500^\circ\text{C}$	120
Figure IV. 5 Microstructures SEM en acier 42CrMo4, trempé et revenu à (a) 500°C , (b) 550°C , (c) 600°C , (d) 650°C et (e) 700°C (10000x).	121

Chapitre V :

Figure V. 1 Variation de la concentration en fonction de la température de revenu et du temps de désorption.....	130
Figure V. 2 Estimation du coefficient de corrélation R^2 pour différents modèles de régression pour le cas où « C_{H_2} » est la variable dépendante et « t » est la variable indépendante	132
Figure V. 3 Estimation du coefficient de corrélation R^2 pour différents modèles de régression dans le cas où C_{H_2} est la variable dépendante et T est la variable indépendante	133
Figure V. 4 Schéma fonctionnel d'un réseau neuronal artificiel perceptron multicouche. (Parastoo et al, 2019).....	135
Figure V. 5 Données de formation (a), test (b), validation (c) et de l'ensemble des résultats (d)	137
Figure V. 6 Validation de la performance du modèle	139
Figure V. 7 Les résultats Instances en fonction des Erreurs entre les cibles et les sorties	140

Liste des tableaux

Chapitre I :

Tableau I. 1 Influence de l'hydrogène sur les concentrations en lacunes.....	17
Tableau I. 2 Classification des pièges (Oudriss 2012).....	27
Tableau I. 3 Effets de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des aciers [Amaro et al, 2014].....	42

Chapitre II :

Tableau II. 1 Comparaison entre la représentation par pixel et celle par caractéristiques (Dreyfus G et al. 2002).....	68
Tableau II. 2 Domaines & application du réseau de neurones (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).....	69
Tableau II. 3 exemples de fonctions d'activations.....	73

Chapitre III :

Tableau III. 1 Composition chimique de l'acier (Carneiro 2011).....	93
Tableau III. 2 Valeurs initiales de la teneur en hydrogène «C ₀ » de la résistance à la traction et de la striction «Z» de l'acier étudié.....	96
Tableau III. 3 Données d'entrées du modèle.....	96
Tableau III. 4 Temps calculatoire en fonction du nombre de simulations.....	105

Chapitre IV :

Tableau IV. 1 composition chimique de l'acier 42CrMo4 (poids %).....	115
Tableau IV. 2 Paramètres de charge d'hydrogène dans l'autoclave ITMA.....	117
Tableau IV. 3 Propriétés mécaniques de l'acier 42CrMo4.....	122

Chapitre V :

Tableau V. 1 Base de données utilisée dans la modélisation par RNA où "t" est le temps de désorption et "C _{h2} " est la concentration de l'hydrogène et "T" est la température de revenu (Zafra et al, 2018).....	128
Tableau V. 2 Les variables statistiques.....	129
Tableau V. 3 Estimation du coefficient de corrélation R ² pour différents modèles de régression pour le cas où « C _{h2} » est la variable dépendante et « t » est la variable indépendante.....	133
Tableau V. 4 Estimation du coefficient de corrélation R ² pour différents modèles de régression dans le cas où C _{h2} est la variable dépendante et T est la variable indépendante.....	133
Tableau V. 5 Valeurs Statistiques du RNA du modèle.....	138

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les systèmes énergétiques actuels et futurs à base d'hydrogène nécessitent la production, le transport, le stockage et l'utilisation d'hydrogène gazeux, fonctionnant souvent à des pressions supérieures à 100 MPa. La sécurité et la durabilité de ces systèmes sont sérieusement compromises par la dégradation subie par les matériaux en présence d'hydrogène.

La fragilisation par l'hydrogène est un phénomène courant qui dégrade les métaux (Barnoush, 2011; Bernstein, 1970; Delafosse et Magnin, 2001; Gangloff et Somerday, 2012 ; Hirth, 1980; Lynch, 2007; Oriani, 1978). Une réduction des propriétés mécaniques des métaux et des alliages est due à l'inclusion d'hydrogène comme impureté.

L'un des grands défis de notre époque est de transformer le débat sur les mécanismes responsables des dommages causés par l'hydrogène et de mettre l'accent sur le développement de modèles prédictifs quantitatifs en utilisant des méthodes stochastiques telles que la méthode de Monté Carlo. Celle-ci consiste à effectuer des tirages aléatoires des variables d'entrée du modèle en très grand nombre. Les réponses du modèle sont évaluées pour chacun de ces tirages. Des traitements statistiques sont ensuite effectués sur ces réponses au moyen des réseaux de neurones artificiels qui appartiennent à la famille de l'intelligence artificielle.

Au cours des cent dernières années, de nombreuses défaillances ont été recensées dans les métaux ; celles-ci peuvent être attribuées aux endommagements causés par l'hydrogène. Eviter la présence d'hydrogène est extrêmement difficile dans certaines situations: L'hydrogène est lié au processus de corrosion, produits dans des environnements humides et acides (Kittel, Smanio, Fregonese, Garnier et Lefebvre, 2010 ; Hadianfard, 2010). Des produits utilisés dans l'industrie pétrochimique, comme pour le cas des pipelines qui contiennent généralement du H₂S. Ce dernier favorise un environnement agressif dans lequel l'hydrogène est produit et diffuse à travers le métal, provoquant ainsi sa fragilisation. Pour cette raison, les aciers de nuance X du pipeline API ont été minutieusement étudiés et testés dans des environnements contenant de l'hydrogène (par exemple, X42 (Bueno, Moreira et Gomes, 2014); X60, X80 et X100 (Hard).

De plus, la protection cathodique, parfois utilisée pour éviter la corrosion, par exemple dans des canalisations enterrées ou dans des environnements marins, entraîne une production d'hydrogène pouvant entraîner des défaillances inattendues (Shipilov et Le May, 2006; Zhenqian, Zhiling, Chun et Shuangping, 2015). De la même façon, l'absorption d'hydrogène

peut se produire dans les pièces qui ont été étalées par électrolyse (Devanathan, Stachurski et Beck, 1963).

Les procédés de soudage peuvent également introduire des quantités importantes d'hydrogène et favoriser la défaillance des matériaux (Moon, Lee et Kim, 2003). L'hydrogène est fourni par les matériaux présents dans le revêtement de l'électrode, dans le flux ou dans le gaz de protection, ainsi que par l'environnement humide (Dayal & Parvathavarthini, 2003). Cette insertion d'hydrogène ajoutée à la présence habituelle de contraintes résiduelles dans la soudure provoque souvent une fissuration assistée par l'hydrogène (Pardal et al. 2013) ; (Hydrogen Induced Cracking).

Au cours des dix dernières années, depuis que l'hydrogène a été proposé comme vecteur énergétique prometteur, l'intérêt pour l'interaction entre l'hydrogène et divers types de matériaux destinés au stockage de l'hydrogène a augmenté. Plusieurs méthodes de stockage de l'hydrogène ont été proposées (Zhou, 2005): de l'hydrogène liquide à des températures cryogéniques, par physisorption, sous forme d'hydrure métallique et à l'état gazeux à haute pression, par ex. entre 35 et 75 MPa (Zheng et al. 2012). L'acier AISI 4140, utilisé dans fabrication des réservoirs de stockage offrent une résistance à la traction entre 850 et 1000MPa et un très bon équilibre entre force, ténacité et résistance à l'usure.

Dans la fabrication des réservoirs à haute pression, des contraintes résiduelles de compression sont généralement introduites. Il a été démontré que les contraintes résiduelles de compression améliorent la durée de vie en fatigue. Cependant, certaines méthodes (auto-frettage, emboutissage, etc.) produisent l'écoulement du noyau interne du réservoir. Cet écoulement réduit certaines propriétés mécaniques du réservoir (Alegre, Bravo et Preciado, 2007). Il est donc nécessaire de trouver un équilibre entre les contraintes de compression et la déformation plastique. Son et al. (Son & Chang, 2012; Son, Hong et Chang, 2012) ont étudié l'effet de l'auto-frettage dans un récipient sous pression pour le stockage de l'hydrogène. Le réservoir était constitué de couches composites et d'un revêtement en aluminium. Les discussions sur la teneur en hydrogène y ont été négligées car on s'attend à ce que le revêtement en aluminium minimise la diffusion de l'hydrogène.

Cependant, les réservoirs sans revêtement en aluminium ou en acier austénitique n'empêchent pas l'hydrogène de diffuser sur toute l'épaisseur et risquent de se fragiliser.

L'hydrogène en solution solide interagit avec le réseau cristallin, modifiant ainsi les propriétés mécaniques du métal ou de l'alliage. De plus, l'interaction de l'hydrogène avec les défauts du réseau, tels que les lacunes, les dislocations, les joints de grains ou les inclusions,

joue également un rôle crucial. Des progrès doivent être accomplis dans la compréhension de ces phénomènes à différentes échelles dans le but de prédire et de prévenir la défaillance de composants industriels soumis à la fragilisation par l'hydrogène.

Par conséquent, l'évaluation de la fragilisation par l'hydrogène doit également s'orienter vers une modélisation numérique ou stochastique du système métal-hydrogène.

Le gradient de concentration de l'hydrogène entre la surface et le cœur du métal crée la diffusion de l'hydrogène d'un site interstitiel à un autre site interstitiel voisin.

Raison pour laquelle la modélisation des deux paramètres qui régissent ce déplacement en partant d'un modèle mathématique basé sur la seconde loi de Fick en tenant compte des conditions aux limites et en intégrant le résultat trouvé dans un programme de simulation basé sur la méthode de Monté Carlo est nécessaire.

D'un point de vue numérique, les résultats obtenus sur la variabilité spatio-temporelle offrent plus d'éléments de compréhension sur la diffusion de l'hydrogène et d'un point de vue mécanique la susceptibilité de l'acier AISI4140 à l'hydrogène réside dans sa striction même si le phénomène de fragilisation implique une fracture avec de faibles déformations, les morphologies de surface présentent généralement de petits défauts de surface (Beachem, 1972; Birnbaum & Sofronis, 1994). Ainsi, même si la fracture semble fragile d'un point de vue macroscopique, un processus plastique important se produit à l'extrémité de la fissure (Oriani & Josephic, 1974).

Il existe un consensus sur la mobilité des dislocations induite par l'hydrogène (Birnbaum & Sofronis, 1994), qui finit par provoquer la localisation de la contrainte et des défaillances qui semblent fragiles à une échelle supérieure. De plus, à partir de calculs atomistiques, il a été montré que l'hydrogène réduit l'énergie de cohésion tout en affaiblissant la liaison métallique (Jiang & Carter, 2004). Cependant, on ne sait pas lequel est prédominant dans chaque situation spécifique ou s'il y a plus de mécanismes impliqués, (Lynch, 2007). Ainsi, la modélisation de la fragilisation par l'hydrogène s'avère difficile en raison de problèmes numériques et d'incertitudes dans le fonctionnement des micro-mécanismes.

Current and future hydrogen-based energy systems require the production, transport, storage and use of gaseous hydrogen, often operating at pressures above 100 MPa. The safety and durability of these systems are seriously compromised by the degradation of materials in the presence of hydrogen.

Hydrogen embrittlement is a common phenomenon that degrades metals (Barnoush, 2011; Bernstein, 1970; Delafosse and Magnin, 2001; Gangloff and Somerday, 2012; Hirth, 1980; Lynch, 2007; Oriani, 1978). A reduction in the mechanical properties of metals and alloys is due to the inclusion of hydrogen as an impurity.

One of the great challenges of our time is to transform the debate on the mechanisms responsible for hydrogen damage and to focus on the development of quantitative predictive models using stochastic methods such as the Monte Carlo method. This method consists of random draws of the input variables of the model in very large numbers. Model responses are evaluated for each of these runs. Statistical treatments are then performed on these responses using artificial neural networks that belong to the artificial intelligence family.

Over the last hundred years, many failures have been recorded in metals; these can be attributed to hydrogen damage. Avoiding the presence of hydrogen is extremely difficult in certain situations: Hydrogen is linked to the corrosion process, produced in humid and acidic environments (Kittel, Smanio, Fregonese, Garnier and Lefebvre, 2010; Hadianfard, 2010). Products used in the petrochemical industry, such as in the case of pipelines that generally contain H₂S. The latter promotes an aggressive environment in which hydrogen is produced and diffuses through the metal, causing it to become brittle. For this reason, the API pipeline's grade X steels have been carefully studied and tested in hydrogen-containing environments (e.g., X42 (Bueno, Moreira and Gomes, 2014); X60, X80 and X100 (Hard).

In addition, cathodic protection, sometimes used to prevent corrosion, for example in buried pipelines or in marine environments, results in hydrogen production that can lead to unexpected failures (Shipilov and Le May, 2006; Zhenqian, Zhiling, Chun and Shuangping, 2015). Similarly, hydrogen absorption can occur in parts that have been spread by electrolysis (Devanathan, Stachurski and Beck, 1963).

Welding processes can also introduce significant amounts of hydrogen and promote material failure (Moon, Lee, Kim, & Kim, 2003). Hydrogen is supplied by the materials present in the electrode coating, in the flux or shielding gas, as well as by the moist

environment (Dayal & Parvathavarthini). This insertion of hydrogen in addition to the usual presence of residual stresses in the weld often causes hydrogen assisted cracking (Pardal et al. 2013); (Hydrogen Induced Cracking).

Over the past decade, since hydrogen has been proposed as a promising energy carrier, interest in the interaction between hydrogen and various types of materials for hydrogen storage has increased. Several methods of hydrogen storage have been proposed (Zhou, 2005): liquid hydrogen at cryogenic temperatures, physisorption, metal hydride and gaseous hydrogen at high pressure, e.g. between 35 and 75 MPa (Zheng et al. 2012). The AISI 4140 steel used in the manufacture of storage tanks offers a tensile strength between 850 and 1000MPa and a very good balance between strength, toughness and wear resistance.

In the manufacture of high pressure vessels, residual compressive stresses are usually introduced. Residual compressive stresses have been shown to improve fatigue life. However, some methods (auto-frettage, stamping, etc.) produce flow from the inner core of the tank. This flow reduces certain mechanical properties of the reservoir (Alegre, Bravo and Preciado, 2007). It is therefore necessary to find a balance between compressive stress and plastic deformation. Son et al (Son & Chang, 2012; Son, Hong and Chang, 2012) studied the effect of auto-frettage in a pressurized hydrogen storage vessel. The container consisted of composite layers and an aluminium liner. Discussions on the hydrogen content were neglected, as the aluminium coating is expected to minimize the diffusion of hydrogen.

However, unlined aluminium or austenitic steel containers do not prevent hydrogen from diffusing through the thickness and may become brittle.

Hydrogen in solid solution interacts with the crystal lattice, thus modifying the mechanical properties of the metal or alloy. In addition, the interaction of hydrogen with lattice defects, such as vacancies, dislocations, grain boundaries or inclusions, also plays a crucial role. Progress needs to be made in understanding these phenomena at different scales in order to predict and prevent the failure of industrial components subject to hydrogen embrittlement.

Therefore, the assessment of hydrogen embrittlement should also be oriented towards numerical or stochastic modelling of the metal-hydrogen system.

The hydrogen concentration gradient between the surface and the core of the metal creates diffusion of hydrogen from one interstitial site to another nearby interstitial site.

Objectif de recherche

L'objectif du présent travail de recherche est d'étudier la susceptibilité de l'acier 42CrMo4 (AISI4140), trempé et revenu à différentes températures, au phénomène de la fragilisation par l'hydrogène.

Des températures de revenu de 500, 550, 600, 650 et 700 ° C ont été utilisées pour analyser l'impact de la présence d'hydrogène sur les propriétés mécaniques en fonction de la microstructure de l'acier.

A cet effet, les éprouvettes ont d'abord été chargées d'hydrogène dans un réacteur sous pression pendant 21 h, fonctionnant à 450 °C et à 195 bars. La quantité d'hydrogène présente dans l'acier a été déterminée à l'aide de l'analyseur d'hydrogène LECO DH603 du département des sciences de matériaux, université d'Oviedo(Espagne).

Des courbes de désorption d'hydrogène ont été établies pour permettre de connaître la teneur en hydrogène des éprouvettes lors des essais mécaniques. De cette manière, il a été possible de corrélérer directement la concentration en hydrogène, en parties par million (ppm), avec la détérioration des propriétés mécaniques.

Enfin, la microscopie électronique à balayage a été utilisée pour étudier les caractéristiques microstructurales de chaque traitement thermique, ainsi que les surfaces de fracture des éprouvettes testées, afin d'identifier les micro-mécanismes de fracture fonctionnant dans chaque cas.

Pour atteindre cet objectif, le manuscrit a été structuré en 5 chapitres :

Le premier chapitre de cette thèse présente les résultats d'une recherche bibliographique.

Cette recherche s'est intéressée au phénomène de fragilisation des aciers par l'hydrogène et ces différents modèles et l'interaction entre l'hydrogène et les défauts microstructuraux et la notion de piégeage de l'hydrogène.

Le deuxième chapitre est un développement mathématique du phénomène de diffusion de l'hydrogène au sein du métal passant par une analyse qui relève des mathématiques appliquées ayant trouvé pour but l'équation qui régit le phénomène de désorption de ce dernier.

Le troisième chapitre porte sur l'analyse probabiliste du problème de désorption de l'hydrogène dans une brève étude bibliographique qui porte sur les méthodes de modélisation stochastique et Incertitudes liées à l'imperfection des modèles rhéologiques et les solutions apportées par l'approche probabiliste ainsi que la prise en compte des éléments d'entrées qui sont considérés comme incertains en champs aléatoires et les calculs probabilistes qui en découlent.

Le quatrième chapitre analyse avec beaucoup de détails les réseaux de neurones, fabriqués de structures cellulaires artificielles. Ces méthodes constituent une approche permettant d'aborder sous des angles nouveaux les problèmes de perception, de mémoire, d'apprentissage et de raisonnement (en d'autres termes, d'intelligence artificielle "I.A.") dans le contexte d'une analyse de l'effet de la température de revenu sur le temps et la concentration de désorption de l'hydrogène par cette méthode innovatrice dans le domaine.

Le cinquième chapitre est une étude de la susceptibilité de l'acier 42CrMo4 à l'hydrogène grâce à différents traitements thermiques dont les températures de revenus variables, cela a permis de savoir quels étaient les propriétés mécaniques les plus atteintes et une microscopie a permis aussi d'observer la microstructures de chacun de ces aciers .

The objective

The objective of this research is to study the susceptibility of 42CrMo4 (AISI4140) steel, quenched and tempered at different temperatures, to provide more elements of understanding of hydrogen embrittlement phenomenon of steels.

The steel was quenched and tempered at various temperatures from 500, 550, 600, 650 to 700°C to analyze the impact of the hydrogen presence on the mechanical properties according to the steel's microstructure.

For this purpose, the specimens were first charged with hydrogen in a pressurized reactor for 21 hours, operating at 450 °C and 195 bar. The amount of hydrogen present in the

steel was determined using the LECO DH603 hydrogen analyser from the Department of Materials Science, University of Oviedo, Spain.

Hydrogen desorption curves have been established in order to determine the hydrogen content of the specimens during the mechanical tests. In this way, it was possible to directly correlate the hydrogen concentration, in parts per million (ppm), with the deterioration of the mechanical properties.

Finally, scanning electron microscopy was used to study the microstructural characteristics of each heat treatment, as well as the fracture surfaces of the test specimens, in order to identify the fracture micro-mechanisms operating in each case.

To achieve this objective, the manuscript has been structured in 5 chapters:

The first chapter of this thesis presents the results of a bibliographical research.

This research was interested in the phenomenon of hydrogen embrittlement of steels and these different models and the interaction between hydrogen and microstructural defects and the notion of hydrogen trapping.

The second chapter is a mathematical development of the hydrogen diffusion phenomenon within the metal, passing through an analysis of applied mathematics having found as a goal the equation that governs the hydrogen desorption phenomenon.

The third chapter deals with the probabilistic analysis of the hydrogen desorption problem in a brief review of the literature on stochastic modeling methods and Uncertainties related to imperfect rheological models and the solutions provided by the probabilistic approach, as well as the consideration of input elements that are considered uncertain in random fields and the resulting probabilistic calculations.

The fourth chapter analyzes in great detail neural networks, made of artificial cell structures. These methods constitute an approach that allows us to approach from new angles the problems of perception, memory, learning and reasoning (in other words, artificial intelligence "A.I.") in the context of an analysis of the effect of tempering temperature on the time and concentration of hydrogen desorption by this innovative method in the field.

The fifth chapter is a study of the susceptibility of 42CrMo4 steel to hydrogen by means of different heat treatments, including variable tempering temperatures. This made it possible to know which mechanical properties were most affected and a microscopy also made it possible to observe the microstructures of each of these steels.

CHAPITRE I : REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

I.1. Interactions Hydrogène-Métal: revue bibliographique

La fragilisation par l'hydrogène (FPH) des métaux a fait et continue de faire l'objet de nombreux travaux. Si les mécanismes de fragilisation semblent être bien connus (Troiano60, Vehoff83, Birnbaum94, Magnin96, Robertson09), ces derniers n'en demeurent pas moins très dépendants de l'état microstructural et de son évolution. Plus ces mécanismes seront complexes, plus il devient difficile d'identifier le processus d'endommagement. Il est important de connaître précisément les caractéristiques microstructurales et leurs conséquences sur l'endommagement (Frappart14)

Un métal est un réseau cristallin dont l'arrangement atomique lui confère des propriétés physico-chimiques particulières. A titre d'exemple, l'orientation du cristal a des effets sur l'adsorption et l'absorption de l'hydrogène qui reste encore mal comprise (Harrington87, Lasia90, Gao94, El Alami07, Lekbir10). Cependant, l'étude de l'interaction hydrogène-matière ne se limite pas à des phénomènes de surface ou de sub-surface. Dans les approches industrielles les plus classiques, les théories de piégeage de l'hydrogène au cœur du matériau sont généralement évoquées pour expliquer les phénomènes de fragilisation des aciers, sans pour autant écarter les effets de l'hydrogène diffusible.

Ce piégeage se caractériserait par une localisation préférentielle de l'hydrogène dans certains défauts du réseau cristallin (joints de grains, précipités, dislocations, lacunes...). Dans le cas des matériaux faiblement alliés, tels que l'acier AISI 4140(42CD4). L'acier 42CrMo4 est un acier allié ayant une teneur en carbone moyenne habituellement utilisé à l'état de trempe et revenue lorsqu'il nécessite une combinaison optimale de résistance et de ténacité. En outre, il offre une forte résistance à la fatigue et à l'usure, ce qui en fait un excellent candidat pour la fabrication, par exemple, de conteneurs destinés au stockage et au transport d'hydrogène gazeux à des pressions élevées. Néanmoins, on sait que l'acier de haute résistance, comme c'est le cas du 42CrMo4, est susceptible au phénomène de fragilisation par l'hydrogène. Aussi, la fragilisation par l'hydrogène peut être définie collectivement comme un phénomène conduisant à une dégradation mécanique, en particulier une perte de ductilité et de ténacité dans les matériaux contenant de l'hydrogène. L'effet a été observé dans de nombreux matériaux tels que Ti, Nb, V et Al (Bastien &Azou, 1951; Dayal & Parvathavarthini, 2003) et particulièrement la susceptibilité à l'hydrogène augmente proportionnellement avec la résistance de l'acier (Hirth, 1980; Louthan Jr et al. 1972).

La première condition pour que la fragilisation se produise est qu'il doit y avoir une source d'hydrogène en contact avec un métal. Les étapes d'insertion d'hydrogène dans le métal sont les suivantes:

- Transport physique (en milieu gazeux ou aqueux) à la surface du métal,
- Adsorption physique: il existe un contact entre le métal et la source d'hydrogène, Adsorption chimique (et désorption) dans H_2 gazeux, la molécule doit être dissociée.
- Dans les milieux aqueux, la réduction de l'hydrogène se produit par réaction cathodique. Absorption: l'hydrogène adsorbé à la surface entre dans le volume métallique.
- Diffusion: les gradients de concentration entraînent le transport d'hydrogène interne.

I.2. Hydrogène et mécanismes de FPH

Plusieurs mécanismes ont été proposés afin de décrire les différents processus de fragilisation par l'hydrogène. Cependant, la variabilité des matériaux et de leurs propriétés ainsi que les conditions d'utilisation et la nature du milieu environnant font qu'il est difficile d'établir une théorie ou une approche fondamentale unique pour décrire la FPH. Néanmoins, si nous ne considérons pas le modèle basé sur la formation d'une phase hydrure riche en hydrogène car seuls certains alliages à base de fer comme les aciers inoxydables austénitiques (Hirth 1980; Narita 1982; Rozenak 1984; Myers 1992) donnent lieu, dans des conditions très sévères d'hydrogénation, à la formation d'un hydrure instable dont la décomposition peut conduire à une fissuration, néanmoins le mécanisme de formation d'hydrure n'est pas approprié pour le fer et l'acier, car aucun hydrure n'est stable jusqu'à une pression d'hydrogène de 2 GPa (Louthan et al, 1972).

I.3. Différents modèles de FPH

Trois grandes familles de modèles peuvent être distinguées (Hirth 1980; Myers 1992). Ces dernières couvrent l'ensemble des mécanismes connus :

Un premier modèle s'appuie sur la diminution de l'énergie de cohésion des interfaces (réseau, joints de grains, interphases...) causée par la ségrégation de l'hydrogène qui favorise la formation et la propagation de fissures (Petch 1952; Petch 1956; Troiano 1966; Lynch 1979; Oriani 1990, Oudriss 2014).

Un second modèle est basé sur la formation de nouveaux défauts tels que les lacunes puis les microcavités en présence d'hydrogène (Fukai 2003a; Carr 2004). La multiplication et la localisation de ces défauts peuvent conduire à l'amorçage et la propagation de fissures, (Oudriss 2014).

Enfin un troisième modèle de FPH repose sur l'émission de dislocations favorisée par la présence d'hydrogène (réduction des interactions élastiques et de la tension de ligne) ce qui peut induire l'amorçage d'une fissure et la localisation de la déformation plastique en avant de la pointe de fissure (Beachem 1972; Birnbaum 1989 ; Delafosse 2001; Sofronis 2001, Oudriss 2014).

Dans la théorie de la pression interne, l'hydrogène atomique est absorbé et accumulé au niveau des défauts internes tels que les lacunes (Zapffe & Sims, 1941). Ensuite, il forme de l'hydrogène moléculaire ou réagit avec le carbone dans la matrice et forme du méthane. Il en résulte une pression interne très élevée qui évolue inversement à la taille de la bulle de gaz et favorise la croissance de vides ou de fissures. Ce mécanisme peut être soutenu par la formation de cloques sans contraintes externes (Rogers, 1968). La pression élevée créée par la formation d'hydrogène moléculaire améliore la croissance des vides et la propagation des fissures. La formation de cloques a été citée dans certaines publications (Perez Escobar et al, 2013; Rogers, 1968). Un exemple est présenté à la figure I.1. Toutefois, il a été jugé qu'il n'est pas général en raison de l'observation de la croissance des fissures sous des pressions d'hydrogène sous pression atmosphérique (Hancock et Johnson, 1966).

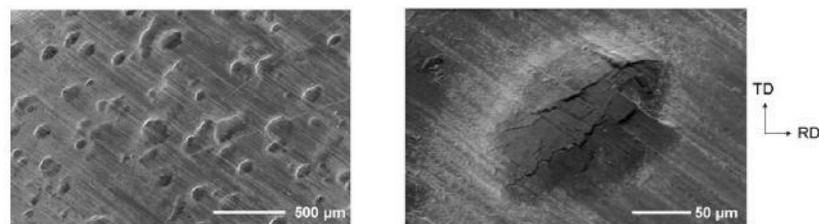


Figure I. 1 formation de cloques dans un acier pur. L'hydrogène est pré-chargé pendant 1h avec une densité de courant 500 A m^{-2} avec de l'arsenic-poison d'électrolytes (Pérez Escobar et al, 2011).

L'hydrogène absorbé peut réduire l'énergie de cohésion du fer dans le réseau, facilitant ainsi le clivage du métal (Oriani & Josephic, 1974; Troiano, 1960). En d'autres termes, on peut considérer que l'hydrogène réduit l'énergie de la surface créée par la croissance des fissures (Petch & Stables, 1952). Ce concept est assuré en raison de la bonne corrélation entre la rupture par clivage et la concentration en hydrogène (Gerberich et al, 1996) et que l'angle en

pointe de la fissure diminue avec l'augmentation de la pression H_2 lorsque le plan de la fissure est parallèle à $\{100\}$ (Vehoff & Rothe, 1983).

1.3.1. Modèle de diminution de l'énergie de cohésion des interfaces

Le modèle de fissuration basé sur la réduction des forces de cohésion a été introduit par Troiano (TRO 60) et développé par Oriani (ORI 77). Il propose que l'hydrogène conditionne les ruptures de liaisons atomiques en pointe de fissure agissant ainsi sur les forces de cohésion interatomique. L'hypothèse de base de ce modèle est que la rupture fragile intervient quand les contraintes locales dépassent les forces de cohésion du réseau, réduites par la présence d'hydrogène. Dans ce modèle, l'hydrogène en solution solide d'insertion diminue les forces requises pour séparer le cristal selon un plan cristallographique, c'est-à-dire qu'il abaisse les forces de cohésion du réseau et l'énergie nécessaire pour favoriser le clivage. Ce modèle suppose des concentrations locales en hydrogène élevées dans le réseau, en particulier aux défauts et interfaces, (Smanio-Renaud 2008).

Un autre modèle stipule que la ségrégation d'atomes d'hydrogène sur une interface peut conduire à la diminution de son énergie de cohésion. Il en résulte une diminution de la contrainte nécessaire à l'amorçage et la propagation de fissures. Ce mécanisme qui peut concerner aussi bien les plans cristallins que les joints de grains ou encore une interface entre deux phases, repose sur une approche initiée par Gibbs (Gibbs 1876; Gibbs 1878). Cette approche a été largement évoquée pour décrire la diminution de l'énergie des joints de grains en présence d'atomes de solutés (Hondros 1996) tels que l'hydrogène. Ce modèle peut englober principalement deux mécanismes de fragilisation par l'hydrogène basés sur la diminution d'énergie : l'un associé à la surface et l'autre relatant des phénomènes au cœur du solide.

Un des principaux mécanismes est celui proposé initialement par Petch et Stables ; celui-ci s'appuie sur la diminution de l'énergie d'une surface métallique sous l'effet de l'hydrogène adsorbé (Petch 1952; Petch 1956). Ce processus est analogue au modèle de Griffith associé à la rupture fragile (Griffith 1921). En effet dans le cas d'un acier parfaitement élastique, la contrainte de rupture est proportionnelle à la racine carrée de l'énergie de surface. Une diminution de l'énergie de surface conduit alors à une diminution de la contrainte nécessaire à l'amorçage et à la propagation d'une fissure. Ce mécanisme, qui privilégie le rôle d'un processus d'adsorption d'hydrogène, ne peut être valide que si ce mécanisme est important au niveau de la surface. Cela suppose un taux de recouvrement en

hydrogène élevé, donc une température modérée ainsi qu'un environnement et un état de la surface favorables. Cependant, cette approche a fait l'objet de plusieurs critiques. En particulier, Oriani s'appuie sur l'influence d'autres atomes adsorbés sur l'énergie de surface (Oriani 1990). L'exemple le plus souvent évoqué est celui de l'atome d'oxygène. En effet, l'adsorption d'oxygène abaisse considérablement l'énergie de surface dans le cas du fer (Oriani 1990). Malgré la baisse de cette énergie, aucune fragilisation n'a été constatée, ce qui remet sérieusement en cause la validité de ce mécanisme à l'échelle d'une surface libre.

Néanmoins, cette approche représente la base du mécanisme de décohésion (Hydrogen Enhanced DEcohesion, HEDE) introduit par Troiano (Troiano 1966) et développé par la suite par Oriani (Oriani 1970; Oriani 1972; Oriani 1974; Oriani 1979) et Lynch (Lynch 1979; Lynch 1988; Lynch 2007). C'est l'un des premiers concepts proposés pour décrire le phénomène de fragilisation par l'hydrogène. Ce mécanisme repose sur l'accumulation de l'hydrogène atomique dans des interfaces telles que les joints de grains qui induit une diminution des forces de cohésion interatomique et, par suite, une diminution de la contrainte nécessaire pour l'amorçage d'une fissure. Lorsque les contraintes locales dépassent celles de la cohésion, une rupture fragile peut se produire. D'un point de vue thermodynamique, ce mécanisme se rapproche de celui de la diminution de l'énergie de surface. Néanmoins, l'hydrogène est supposé absorbé dans cette configuration. La ségrégation d'hydrogène absorbé vers les interfaces d'un matériau métallique peut conduire suivant le mécanisme de Gibbs (Gibbs 1876; Gibbs 1878) à réduire les énergies de cohésion entre atomes et par conséquent les forces de liaisons diminuent.

1.3.2. Modèle de plasticité

Plusieurs autres modèles reposant cette fois sur une augmentation de la plasticité locale induite par l'hydrogène sont proposés dans la littérature.

Beachem (Beachem 72) suggère que l'enrichissement en hydrogène en pointe de fissure facilite le mouvement des dislocations et les mécanismes de déformation plastique conduisant à la rupture du matériau. Cette observation est à la base du mécanisme nommé Hydrogen Enhanced Localized Plasticity (HELP). L'augmentation de la mobilité des dislocations serait liée à la réduction des interactions entre dislocations mais aussi entre les dislocations et les autres obstacles (atomes de carbone, joints de grains) en présence d'hydrogène. Les dislocations pourraient ainsi produire des empilements plus denses et plus compacts en présence d'hydrogène. Il en résulterait une distribution de zones microscopiques présentant de très grandes déformations entourées de zones moins ductiles du fait de

l'empilement des dislocations. Lorsque l'application d'une contrainte conduit au dépassement de la limite de contrainte à la rupture dans ces zones, il y a rupture de l'éprouvette. La rupture serait alors ductile d'un point de vue microscopique et fragile d'un point de vue macroscopique (EAS 81, Smanio-Renaud 2008).

La fragilisation par l'hydrogène initiée par l'interaction hydrogène-dislocations représente le principal modèle, le plus évoqué, pour expliquer l'endommagement des pièces métalliques en présence de l'hydrogène. Les principaux mécanismes associés à ce modèle sont : l'émission de dislocations induites par l'hydrogène adsorbé AIDE (Adsorption Induced Dislocation Emission) (Lynch 1988) et l'accroissement de la localisation de la plasticité par l'hydrogène absorbé HELP (Hydrogen Enhanced Localized Plasticity) (Beachem 1972; Birnbaum 1988 a; Sirois 1992; Birnbaum 1994; Delafosse 2001; Meyers 2006).

1.3.3. Modèle associé à la formation de lacunes

Le modèle de formation de lacunes associée à la présence d'hydrogène représente une approche qui suscite beaucoup d'intérêt ces dernières années. Ce modèle a été largement étudié par Fukai, McLellan, Carr et leurs équipes dès les années 90 (Fukai 1995; Zang 1999; Fukai 2000; Fukai 2001; Fukai 2003a; Fukai 2003b; Mao 2003; Carr 2004; Fukai 2005; Carr 2006). L'approche repose sur la capacité de l'hydrogène absorbé à former de nouvelles lacunes dites « surabondantes » appelées les « SuprabundantVacancy » (SAV) et les stabiliser. En effet, plusieurs travaux ont constaté une différence entre les concentrations en hydrogène piégé et les densités des sites de piégeage potentiels (attendu en regard des microstructures étudiées). D'autre part, des mesures de concentrations de lacunes avant et après chargement en hydrogène ont clairement démontré un excès de concentration en lacunes dans le fer, le nickel et le cuivre (Fukai 2001; Fukai 2003b; Carr 2004; Carr 2006). Ces constatations expérimentales ont conduit Fukai, Carr et Mc Lellan à suggérer la formation de nouvelles lacunes sous l'influence de l'hydrogène.

Nous avons regroupé dans le tableau I.1 différentes valeurs de concentrations de lacunes dans le cuivre et le fer- α . Ces données montrent clairement l'influence de l'hydrogène sur la formation de lacunes (Carr 2004; Sakaki 2006; Ungar 2007).

Tableau I. 1 Influence de l'hydrogène sur les concentrations en lacunes

(Carr 2004; Sakaki 2006; Ungar 2007)	Concentration en lacunes [V/M]	
	Cuivre	Fer- α
Cristal (M) (Sans H)	10^{-16}	10^{-34}
Joint de grains (GB) grain boundaries (Sans H)	6.10^{-14}	-
Cristal + Joint de grains + Hydrogène (H) (0,49 ppm wt)	-	10^{-8}

1.3.4. Modèle associé à l'affaiblissement des liaisons interatomiques en pointe de fissure

Le modèle proposé par Lynch (LYN 88) repose sur l'affaiblissement des liaisons interatomiques en pointe de fissure. L'accommodation de la plasticité conduirait à la formation de microcavités en avant de la fissure et leur coalescence serait à l'origine de l'avancement de cette dernière. Dans ce modèle, l'adsorption en surface de l'hydrogène pourrait conduire à une diminution des contraintes nécessaires pour créer des dislocations. En conséquence, une localisation de la déformation plastique se produirait. Toutefois, ces explications sont contredites par l'orientation à 90° de l'amorce de fissure SSC en surface telle qu'expliquée dans (CRO 04a Smanio-Renaud 2008).

1.3.5. Modèle de rupture différée

En remplacement Crolet (CRO 04a) propose en effet un mécanisme de rupture différée sous contrainte où l'insertion en force de protons dans le réseau cristallin dilate celui-ci. Ceci impliquerait donc localement des contraintes triaxiales mais uniquement dans les toutes premières mailles cristallines. Le chargement en hydrogène par transfert protonique direct se traduirait donc par une tension de surface croissante à laquelle s'ajoutent les contraintes de service, le tout pouvant conduire à l'amorçage de fissures et donc à la rupture à terme. (Smanio-Renaud 2008)

I.4. Théorie de la pression : Cas des fortes activités d'hydrogène

En présence d'une très forte pression équivalente d'hydrogène ou sous l'effet d'une sursaturation associée au brusque changement de température d'un matériau contenant une

quantité élevée d'hydrogène, différentes formes de fissuration des aciers peuvent être observées en l'absence de contrainte imposée: cloquage, fissuration interne, disbonding... (Brass et al 1999). Cette fissuration résulte d'une recombinaison de l'hydrogène atomique en hydrogène moléculaire sur des défauts (microcavités...) qui jouent le rôle de pièges (Zapffe 1941). Si la sursaturation en hydrogène dans le réseau est grande, la pression d'hydrogène dans les microcavités peut être suffisamment élevée pour conduire à une fissuration (IINO 1985). Ce mécanisme joue un rôle important, à la température ambiante, dans la fragilisation des aciers exposés à de fortes fugacités d'hydrogène cathodique (notamment en milieu H₂S et présence de « poisons », (Brass et al 1999), ou soumis à une importante sursaturation d'hydrogène interne. Il se manifeste par une perte irréversible des propriétés mécaniques de l'acier. L'amplitude de la fissuration dépend également de la présence de contraintes internes dans le matériau et de la nature, de la densité et de la répartition des sites de piégeage.

I.5. Hydrogène et défauts : diffusion et piégeage

Sur la base du modèle dit de piégeage d'hydrogène : un piégeage d'hydrogène peut être considéré comme la liaison de l'atome d'hydrogène à des impuretés, des défauts de structure ou des constituants de la microstructure dans l'alliage.

Le phénomène de FPH est directement dépendant des mécanismes de diffusion et de piégeage de l'hydrogène dans les matériaux métalliques. En effet, la compréhension des modes de transport et de ségrégation de l'hydrogène dans une microstructure complexe facilite l'identification des mécanismes d'amorçage des fissures. Ces dernières peuvent résulter directement de l'interaction entre l'hydrogène et les défauts microstructuraux (joints de grains, dislocations, lacunes...etc.). Cette corrélation hydrogène/défauts microstructuraux permet de prédire les risques de rupture des pièces métalliques en service. (Oudriss 2012), la transformation martensitique conduira à la création de nombreuses interfaces (joints des anciens grains d'austénite, joints de paquets, joints de lattes) mais sera également à l'origine de l'existence d'une forte densité de défauts cristallins linéaires (dislocations intra et inter lattes) et ponctuels (lacunes). Ainsi, il est possible de résumer la structure martensitique selon plusieurs échelles : l'échelle mésoscopique (les anciens grains austénitiques), l'échelle des lattes (dimensions, désorientations), l'échelle des précipités (densité et nature des précipités), l'échelle des dislocations (densité et type des dislocations) et finalement, l'échelle des interstices (sites octaédriques et tétraédriques). Chacune de ces échelles aura son rôle à jouer

sur les propriétés mécaniques des matériaux mais également sur les phénomènes de diffusion et de piégeage d'espèces diffusantes comme l'hydrogène. (Frappart 2014)

1.5.1. La littérature offre plus de connaissances sur le piégeage et transport par dislocation

Le transport de l'hydrogène par les dislocations mobiles fait l'objet de plusieurs discussions ces dernières années. Ce mécanisme a été introduit pour la première fois par Bastien et Azou en 1951 (Bastien 1951) afin d'expliquer une accélération de la diffusion d'hydrogène lors d'une déformation de certains matériaux cubiques centrés tels que le fer. Dans le cas d'une structure c.f.c., Donovan a proposé un modèle reliant la densité de dislocations mobiles à la concentration d'hydrogène piégé autour d'une dislocation. Il a constaté qu'à température ambiante le flux d'hydrogène transporté par les dislocations mobiles est du même ordre de grandeur que le flux global, ce qui suggère que le transport de l'hydrogène par les dislocations mobiles représente le principal mécanisme de transport de l'hydrogène (Oudriss 2012).

L'énergie de liaison entre l'hydrogène et les dislocations dans le fer α peut être déduite à partir de plusieurs techniques expérimentales. Tout d'abord, les énergies de liaison avec des dislocations d'environ 27 kJ mol^{-1} sont obtenues à l'aide de mesures de frottement interne (Zielinski et al, 1977).

Les études de Kumnick et Johnson (1980) sur la perméation de l'hydrogène sur du fer α de grande pureté déformé par laminage à froid ont montré que les dislocations sont des sites de piégeage pour l'hydrogène, mais avec une «énergie de liaison très élevée de $E_b = 60 \text{ kJ mol}^{-1}$ et des densités de pièges dans la plage de 10^{20} - 10^{23} m^{-3} en fonction du laminage à froid les pièges sont probablement soit des dislocations ou des débris d'imperfection laissés par des dislocations en mouvement. Choo et Lee (1982) ont eu recours à l'analyse de désorption thermique pour identifier les types de sites de piégeage et évaluer les énergies de liaison correspondantes.

Ils ont surveillé le dégagement d'hydrogène des échantillons chargés pendant le chauffage à des vitesses de chauffage uniformes. L'énergie de liaison a été déduite des températures maximales observées des courbes de désorption à différentes vitesses de chauffage et à $19,2 \text{ kJ mol}^{-1}$ pour les dislocations. Donovan (1976) a signalé un dégagement accéléré d'hydrogène au cours de la déformation du matériau pré-chargé, attribué au dégagement d'hydrogène provoqué par le mouvement des dislocations. Par conséquent, la

vitesse de libération dépend de la déformation, comme l'avait mentionné dans ses travaux de recherche Louthan et al, 1972.

Si la déformation plastique est mise en œuvre lors de l'exposition à l'hydrogène, sa diffusivité apparente de l'hydrogène est efficacement accrue. La figure I.2 montre clairement la plus grande concentration d'hydrogène atteinte à l'intérieur de l'échantillon par la déformation plastique du nickel (Louthan et al, 1972). L'interaction entre l'hydrogène et la dislocation a amélioré l'absorption et la profondeur de pénétration de l'hydrogène dans l'échantillon (Ryu,2012).

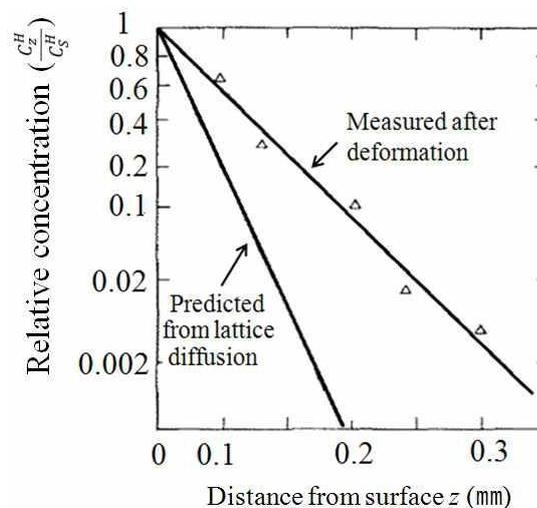


Figure I. 2 Concentration relative en fonction de la distance de pénétration dans un échantillon de nickel durant l'essai de traction déformé lors de l'exposition à l'hydrogène, comparé au profil prédit pour la diffusion uniquement (Louthan et al, 1972).

Brass et Chêne (1999) ont travaillé sur des superalliages monocristallins base nickel ont permis de mettre en évidence ce phénomène par la mesure du flux de désorption de tritium pré-introduit dans une éprouvette soumise à un essai de traction.

La figure I. 3 représente l'évolution de l'activité du tritium superposée avec celle de la contrainte appliquée en fonction du temps. Dans le domaine plastique, caractérisé par le déplacement des dislocations, l'activité du tritium augmente brutalement. Le calcul des coefficients de diffusion effective du tritium montre que la désorption est plus rapide dans le domaine plastique que dans le domaine élastique. L'émission de dislocations et leur forte mobilité ont conduit Chêne et Brass à mettre en avant l'effet accélérateur des dislocations mobiles sur la diffusion de l'hydrogène.

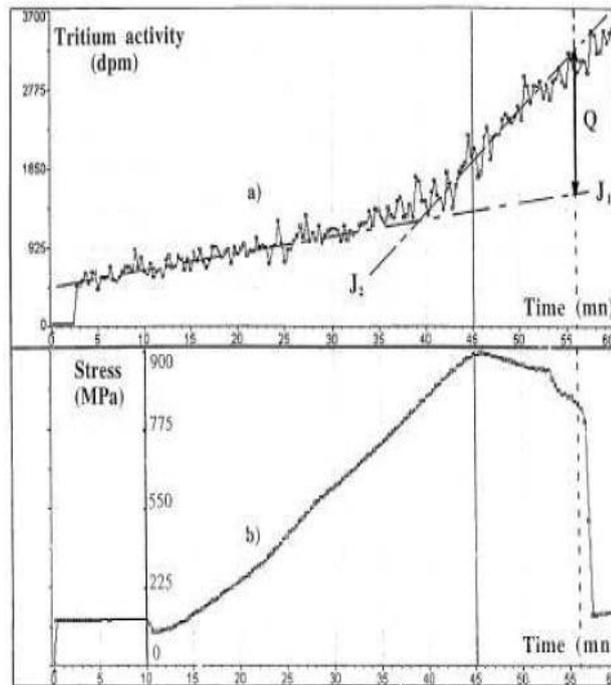


Figure I. 3 Profil de l'activité du tritium et de la contrainte appliquée en fonction du temps (Chêne 1999).

I.6. Origine et état de l'hydrogène dans un métal

L'entrée de l'hydrogène dans un métal résulte de sa mise en contact avec différentes sources possibles d'hydrogène : adsorption de molécules H_2 , décharge de protons ou d'espèces chargées issues d'un électrolyte ou d'un plasma, décomposition d'espèces hydrogénées à la surface du métal.

De l'hydrogène interne peut avoir été introduit au préalable lors de diverses opérations (élaboration du métal, soudage...) ; il peut également être formé in-situ sous l'effet de réactions nucléaires (Brass, 2000).

I.7. Diffusion de l'hydrogène

Du fait de sa faible solubilité, l'hydrogène diffuse dans le fer selon les mécanismes classiques d'hétéro-diffusion à dilution infinie. Les lois de Fick sont directement applicables aux températures usuelles à ce type de diffusion en l'absence de force de transport.

Lors d'un essai de perméation électrochimique, les variations du flux et de la concentration en hydrogène dans un métal peuvent être décrites par ces deux lois, qui, après résolution, permettent d'accéder aux valeurs de coefficients de diffusion apparent. Or,

l'application des lois de Fick suppose l'absence de sites de piégeage, un rapport épaisseur/surface inférieur à 1/20 (Hutchings93), une diffusion unidirectionnelle et perpendiculaire aux faces de la membrane et enfin un comportement isotrope du matériau vis-à-vis des processus de diffusion. A l'issue de ces considérations, O-x est l'axe de diffusion privilégié :

$$\frac{\partial C_{\text{hyd}}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{\text{hyd}}}{\partial x^2} \quad \text{Eq.I. 1}$$

D : coefficient de diffusion

C_{hyd} : concentration en hydrogène

t : temps

x : la distance selon la direction de la diffusion

La diffusion de l'hydrogène peut cependant être contrôlée par d'autres gradients que le gradient de concentration : champ de contrainte, champ électrique, gradient de température. Il est ainsi possible de modéliser la pénétration (ou la désorption) de l'hydrogène à partir de la résolution des équations de Fick pour différentes conditions aux limites (géométries d'échantillon...) (Crank ,1975).

1.7.1. Diffusion en présence de pièges

De nombreux modèles ont été développés pour tenter de déterminer à partir de mesures de perméabilité, les grandeurs caractéristiques du piégeage ; un grand nombre d'hypothèses simplificatrices leur sont généralement associées. À titre d'exemple, nous nous limiterons ici à présenter brièvement les hypothèses associées au modèle simple d'Oriani (Oriani 70) qui ne considère qu'un seul type de site de piégeage :

- Transport d'hydrogène par diffusion interstitielle
- Densité de sites interstitiels N_r très grande par rapport à celle des pièges N_p
- Faible concentration en hydrogène interstitiel C_r
- Un seul type de piège, une seule énergie de piégeage ΔG_p indépendante du taux d'occupation un seul atome par site ;
- Absence d'interaction entre sites de piégeage, mais équilibre local $H_{\text{piège}}/H_{\text{interstitiel}}$
- Flux stationnaire d'hydrogène indépendant du piégeage

Ce modèle permet d'établir une relation entre le coefficient de diffusion D_{app} déterminé expérimentalement à partir du régime transitoire de perméation et le coefficient de diffusion réticulaire D_r correspondant à une diffusion sans piégeage. Des modèles plus élaborés ont été développés (Caskey 1975, Iino 1979, Leblond 1983) ; ils permettent, notamment, de caractériser le piégeage par une comparaison des profils de perméation expérimentaux avec les profils calculés.

La deuxième loi de Fick donne une relation décrivant l'évolution du gradient de concentration en fonction du temps:

$$\frac{\partial C_{hyd}}{\partial t} = -D \nabla^2 C_{hyd} \quad \text{Eq.I. 2}$$

Si cela est simplifié à une dimension, ce qui nécessite une composition de substrat et un coefficient de diffusion uniforme, la deuxième loi de Fick devient:

$$\frac{\partial C_{hyd}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{hyd}}{\partial x^2} \quad \text{Eq.I. 3}$$

En coordonnées cylindriques, l'équation de diffusion de Fick est décrite par l'équation suivante:

$$\frac{\partial C_{hyd}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{hyd}}{\partial r^2} \quad \text{Eq.I. 4}$$

L'équation peut être résolue en procédant par séparation des variables :

$$C_{hyd} = \mathcal{R}(r).F(t) \quad \text{Eq.I. 5}$$

Où, \mathcal{R} et F sont en fonction de r et t respectivement

La solution générale est donnée par:

$$C_{hyd}(u, t) = \mathcal{U} \exp(-D\alpha^2 t) \quad \text{Eq.I. 6}$$

Où \mathcal{U} est en fonction de r , satisfaisant l'équation de Bessel d'ordre zéro :

$$\frac{d^2 \mathcal{U}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\mathcal{U}}{dr} + \alpha^2 \mathcal{U} = 0 \quad \text{Eq.I. 7}$$

Les solutions de l'équation I.7 peuvent être obtenues en termes de fonctions de Bessel, choisies de manière appropriées pour que les conditions initiales et aux limites soient remplies. Ainsi, en considérant les conditions initiales et aux limites suivantes :

$$C_{hyd}(r, 0) = f(r) = C_0 \text{ for } 0 \leq r \leq r_{cy1}$$

Et $t=0$

$$C_{hyd}(r_{cyl}, t) = C_{\infty} \text{ for } r = r_{cyl} \text{ et } t > 0$$

La solution exacte de l'équation (I.4) est donnée par l'expression suivante:

$$C_{hyd}(r, t) = C_{\infty} \left\{ 1 - \frac{2}{r_{cyl}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_n} \frac{J_0(r\alpha_n)}{J_1(r_{cyl}\alpha_n)} \exp(-D\alpha_n^2 t) \right\} + \frac{2}{r_{cyl}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-D\alpha_n^2 t) \frac{J_0(r\alpha_n)}{J_1^2(r_{cyl}\alpha_n)} \int_0^r r f(r) J_0(r\alpha_n) dr \quad \text{Eq.I. 8}$$

Où α_n représente les racines positives de la fonction de Bessel:

$$J_0(r\alpha_n) = 0$$

Dans notre cas, la distribution de concentration initiale est $f(r) = C_0$ et le rayon $r=r_{cyl}$ on considère que la concentration à la surface est ($C_{\infty}=0$), l'équation devient

$$C_{hyd}(r, t) = \frac{2C_0}{r_{cyl}} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-D\alpha_n^2 t) \frac{J_0(r\alpha_n)}{\alpha_n J_1(r_{cyl}\alpha_n)} \quad \text{Eq.I. 9}$$

Comme nous avons un taux de diffusion constant d'hydrogène τ_0 par unité de surface:

$$\tau_0 = -D \left(\frac{\partial C_{hyd}}{\partial r} \right) \text{ pour } r = r_{cyl} \quad \text{Eq.I. 10}$$

$$C_{hyd}(r, t) - C_0 = -\frac{\tau_0 r_{cyl}}{D} \left\{ \frac{2Dt}{r_{cyl}^2} + \frac{r^2}{2r_{cyl}^2} - \frac{1}{4} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_n^2} \frac{J_0\left(\frac{r\alpha_n}{r_{cyl}}\right)}{J_0(\alpha_n)} \exp\left(-\frac{Dt\alpha_n^2}{r_{cyl}^2}\right) \right\} \quad \text{Eq.I. 11}$$

I.8. Solubilité de l'hydrogène

La pénétration de l'hydrogène fait appels à deux étapes successives : elle met en jeu l'adsorption (fixation de molécule liquide ou bien gazeuse sur un atome du solide) en surface et la diffusion en volume. Le passage au travers de l'interface source hydrogène/métal fait appel à plusieurs niveaux d'énergie (surface, sub-surface volume) ; alors on peut dire que l'hydrogène se déplace d'un site d'adsorption chimique à un site interstitiel. (Brass et al,2000)

I.9. Perméabilité de l'hydrogène

L'interaction entre l'état mécanique et les phénomènes de diffusion et de ségrégation est décisive pour comprendre l'endommagement des matériaux. La perméation électrochimique est actuellement un essai usuel pour déterminer des propriétés physiques liées à la diffusion et au piégeage. (Frappart2014). Cependant, l'effet de la contrainte dans le domaine élastique a reçu peu d'attention en termes d'essais expérimentaux, (De Kazincsy55, Beck66, Wriedt70, Bockris71, Zakroczymsky85, Hadam09).

Ces travaux soulignent le fait que le coefficient de diffusion reste constant et que la solubilité de l'hydrogène augmente dans le domaine d'élasticité. Le rôle du champ de contrainte sur le potentiel chimique de l'hydrogène a pourtant été largement étudié dans différentes situations comme la diffusion, la métallurgie ou encore en corrosion, ... (Beck66, Li66, Nowick72, West80, Johnson81, Kirchheim82, Larché85, Gutman94, Sofronis95, Chateau02, Sahal06).

I.10. Modes de piégeage de l'hydrogène

Le piégeage de l'hydrogène représente l'un des principaux paramètres influant sur les mécanismes de fragilisation par l'hydrogène. Il est directement lié aux défauts microstructuraux. Ces défauts ont une énergie d'interaction avec l'hydrogène ΔE_T plus élevée que celle des sites interstitiels du réseau ΔE_L (Oriani 1970; Frappart 2010). Ils provoquent une localisation de l'hydrogène. La capacité d'un défaut à piéger l'hydrogène dépend de son niveau d'énergie (figure I.4). L'équilibre entre la concentration d'hydrogène piégé et l'hydrogène interstitiel peut être approché par les modèles cinétiques proposés par McNabb et Krom [McNabb63, Krom2000]. L'état d'énergie associé aux deux types de sites (hydrogène interstitiel L et hydrogène piégé T) et les barrières énergétiques en résultant sont présentés sur la figure I.4 :

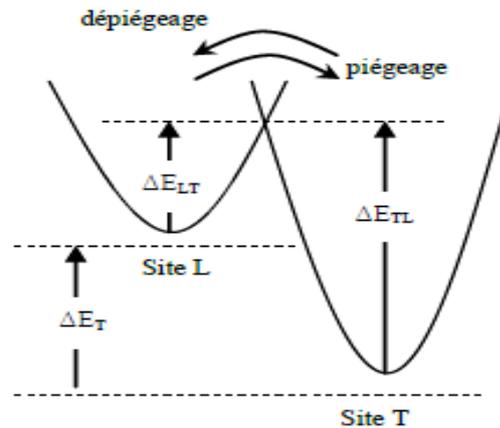


Figure I. 4 Représentation des niveaux d'énergie associés à un site interstitiel et à un site de piégeage avec ΔE_L : l'énergie d'activation de la diffusion, ΔE_T : l'énergie de piégeage et ΔE_{TL} : l'énergie totale du piège (Frappart 2011a, Oudriss 2012).

D'une manière générale, un piège est considéré comme un puits d'énergie au niveau duquel l'hydrogène est susceptible de diminuer son potentiel chimique. (Oudriss 2012)

D'un point de vue macroscopique, le piégeage est caractérisé généralement par une diminution du coefficient de diffusion effective (Nagumo 1999a; Nagumo 1999b; Huang 2003; Frappart 2010; Frappart 2011b; Frappart 2012) et une augmentation de la solubilité apparente de l'hydrogène (Choo 1982; Nagumo 1999a; Nagumo 1999b; Huang 2003; Frappart 2012). Les travaux de Frappart (Frappart 2011a; Frappart 2011b; Frappart 2012), menés sur des aciers martensitiques HLE ont permis de mettre en évidence de façon claire que la multiplication des dislocations, qui représentent des sites potentiels de piégeage pour l'hydrogène, conduit à une chute du coefficient de diffusion effective et une augmentation de la solubilité apparente de l'hydrogène. Ces effets peuvent être formalisés dans le cadre d'un modèle de piégeage proposé et décrit dans la littérature (Mc Nabb 1963; Oriani 1970; Leblond 1983a; Leblond 1983b; Krom 2000 Oudriss 2012). La compréhension du phénomène de piégeage a fait l'objet de nombreux travaux (Mc Nabb 1963; Oriani 1970; Abraham 1978; Hirth 1980; Pressouyre 1980; Kirchheim 1982a; Leblond 1983b; Tison 1983; Myers 1992), et elle a permis d'établir plusieurs classifications basées sur la taille des pièges, leur niveau d'énergie ou leur localisation (Pressouyre 1979).

Par souci de simplification, que ce soit pour un métal ou un alliage de structure c.c. ou c.f.c., nous avons choisi de classer les types de pièges par rapport à leur niveau d'énergie de piégeage ΔE_{TL} . Cela permet de définir deux principales catégories de pièges.

Les pièges réversibles qui présentent un niveau d'énergie de piégeage compris entre 0,2 et 0,45 eV (Pressouyre 1979). Pour ce type de pièges, en raison des faibles niveaux d'énergie, l'hydrogène peut se dé-piéger à température ambiante. Les principaux défauts microstructuraux susceptibles de représenter des pièges réversibles sont : le champ hydrostatique autour des dislocations coins (Choo 1982; Young Jr 1998; Château 2002b) et des précipités cohérents et/ou semi-cohérents (Frappart 2011a; Oudriss2011, Oudriss 2012).

Au-dessus de 0,5 à 0,6 eV (Pressouyre 1979), les pièges sont considérés comme irréversibles. Le cœur des dislocations, les lacunes ainsi que les précipités dits incohérents représentent les principaux sites de piégeage de nature irréversible (Kumnick 1980; Johnson 1989; Uhlemann 1998; Young Jr 1998; Thomas 2002; Wei 2006; Chandler 2008; Counts 2010). Le dé-piégeage de l'hydrogène de ces sites nécessite une énergie importante et donc des températures très élevées. Le tableau I.2 regroupe quelques exemples de sites de piégeage avec leur niveau d'énergie dans différents matériaux. (Oudriss 2012)

Tableau I. 2 Classification des pièges (Oudriss 2012)

Nature du piège	Type de défaut	Matériau	Energie de piégeage ΔE_{TL} (eV)	Référence
Réversible	Champs de dislocation	Fe	0,27	(Choo 1982)
		Fe-Ti	0,25	(Pressouyre 1979)
		Al	0,28	(Young Jr 1998)
Réversible	Joints de grains	Ni	0,12 – 0,21	(Brass 1995)
		Fe	0,17	(Choo 1982)
		Fe-Ti	0,55 – 0,61	(Pressouyre 1978)
		Pd	0,17 – 0,48	(Mütschele 1987)
Réversible	Précipités cohérents Précipités semi – cohérents	Fe (TiC)	0,3 – 0,4	(Wei 2006)
		Fe ₃ C	0,27	(Frappart 2011a)
Irréversible	Cœur de dislocation	Ni	0,62	(Kumnick 1980)
		Ni	0,5	(Chandler 2008)
		Fe	0,47 – 0,60	(Thomas 2002)

	Lacunes	Al Cu Ni Fe Fe Fe	0,71 0,40 0,41 0,51 0,57 – 0,60 0,63	(Young Jr 1998) (Johnson 1989) (Counts 2010) (Fukai 2005)
	Précipité incohérent	Fe , Alliage 600, 800 (TiC) Fe (TiC)	0,91 – 0,98 0,68 – 1,4	(Uhlemann 1998) (Wei 2006)
	Joints de grains (forte désorientation)		0,55 – 0,61	(Pressouyre 1979)

1.10.1. Influence du piégeage

Selon la relation envisagée entre les pièges et les interstices, une expansion numérique différente de $\partial C_T / \partial t$ est considérée :

$$\partial C_T / \partial t = (\partial C_T / \partial t)_{LT} + (\partial C_T / \partial t)_{TL} \quad \text{Eq.I. 12}$$

Le nombre d'atomes d'hydrogène se déplaçant des sites interstitiels δ aux sites de piégeage T est proportionnel à la concentration d'hydrogène placé sur les sites interstitiels CL, la probabilité PLT de saut entre un site L et un site T et la probabilité PT qu'un site voisin de l'atome d'hydrogène soit un site de type T libre. La probabilité PLT s'exprime donc comme une fonction d'une fréquence de saut ν (généralement prise égale à la fréquence de Debye 10^{13}s^{-1}) et de la barrière énergétique ELT nécessaire pour passer d'un site δ à un site T

1.10.2. Diffusion effective

L'une des premières tentatives, sinon la première, de développement d'une simulation par éléments finis d'une diffusion à deux niveaux a été réalisée par Sofronis et Mc Meeking (Sofronis et McMeeking, 1989). L'équation générale des transports peut être écrite :

$$\left(\frac{\partial C_T}{\partial C_L} + 1 \right) \frac{\partial C_T}{\partial t} - \nabla \cdot (D_L \nabla C_L) + \nabla \cdot \left(\frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla \sigma_h \right) = 0 \quad \text{Eq.I. 13}$$

Où : \bar{V}_H est le volume molaire partiel

Il est possible de définir un coefficient de diffusion effectif représentant le retard de diffusion produit par le piégeage :

$$D_{eff} = D_L \frac{1}{1 + \partial C_T / \partial t} \quad \text{Eq.I. 14}$$

Enfin, l'équation générale utilisée par Sofronis et Mc Meeking est la suivante :

$$\frac{D_L}{D_{eff}} \frac{\partial D_L}{\partial t} = \nabla \cdot (D_L \nabla C_L) + \nabla \cdot \left(\frac{D_L C_L V_H}{RT} \sigma_h \right) \quad \text{Eq.I. 15}$$

L'équation d'Oriani est considérée comme suit :

$$D_{eff} = D_L \frac{1}{C_L + C_T(1 - \theta_T)} \quad \text{Eq.I. 16}$$

Parfois, les concepts de diffusivité effective et apparente sont utilisés comme synonymes.

1.10.3. Piège réversible

Si les éprouvettes ont été préchargées avec de l'hydrogène de n'importe quelle source ou de quelque manière que ce soit et si une fragilisation est constatée au cours des essais mécaniques, la fragilisation est due soit à une fragilisation interne réversible, soit à une fragilisation interne : réaction de fragilisation à l'hydrogène. Si des hydrures ou d'autres nouvelles phases contenant de l'hydrogène se forment pendant les essais sur l'hydrogène gazeux, la fragilisation aux fins de la présente étude sera attribuée à la fragilisation de la réaction de l'hydrogène. Pour toute fragilisation déterminée lors d'essais mécaniques dans l'hydrogène gazeux autre que la réversibilité interne et la fragilisation par réaction de l'hydrogène, la fragilisation de l'environnement hydrogène est supposée en être responsable.

La fragilisation par l'hydrogène réversible interne a également été appelée fragilisation à faible vitesse de déformation ou défaillance retardée. C'est le type classique de fragilisation par l'hydrogène ; cela a été assez étudié. Une grande attention a été portée au problème résultant de la galvanoplastie, en particulier du cadmium sur des composants en acier à haute résistance. Les traitements de transformation, tels que la fusion et le décapage, sont d'autres sources d'hydrogène. Plus récemment, les effets fragilisant de nombreux procédés de corrosion sous contrainte ont été attribués à l'hydrogène produit par la corrosion, (Hugh et al, 1972). Une fragilisation interne réversible par l'hydrogène peut survenir après l'absorption d'une très faible concentration moyenne d'hydrogène par l'environnement. Cependant, les concentrations locales d'hydrogène sont nettement supérieures aux valeurs moyennes en vrac. Pour les aciers, la fragilisation est généralement la plus grave à la température ambiante lors des essais de rupture différée (fatigue statique) ou de vitesse de déformation lente. Cette nature dépendante du temps (période d'incubation) de fragilisation indique que la diffusion

d'hydrogène dans le réseau contrôle ce type de fragilisation. Des fissures apparaissent à l'intérieur, généralement sous la racine d'une entaille dans la région de la tri-axialité maximale. La fragilisation de l'acier est réversible (il est possible de rétablir la ductilité) en allégeant la contrainte appliquée et en vieillissant à la température ambiante, à condition que des fissures microscopiques ne se soient pas encore manifestées. Une fragilisation interne réversible par l'hydrogène a également été observée dans une grande variété d'autres matériaux, notamment les alliages à base de nickel et les aciers inoxydables austénitiques, à condition qu'ils soient fortement chargés en hydrogène. (Hugh 1972)

1.10.4. Piège irréversible

Il faut noter que les types de pièges sont trop dispersés dans les énergies de liaison empiriques. Par exemple, il a été constaté que les joints de grains avaient une énergie d'activation de 17 kJ / mol, alors que d'autres auteurs ont cité les joints de grains comme des pièges irréversibles, par ex. Dadfarnia et al, 2011, utilisent 58,6 kJ / mol comme énergie de liaison. Les dislocations devraient également avoir une énergie de liaison incertaine allant de 20 à 60 kJ / mol, (diaz). Une énergie de liaison de 60 kJ / mol, représente un piège irréversible si la limite proposée par (R. A. Oriani, 1970) est prise en compte. Cependant, cette limite dépend de la cinétique de diffusion et de la température en particulier.

Le flux entre les pièges est négligé, comme dans la littérature et cette hypothèse est vérifiée numériquement, car il a été confirmé que pour les paramètres utilisés par Sofronis et Mc Meeking pour le fer alpha (Sofronis & Mc Meeking, 1989), J_i est insignifiant. Pour les pièges à forte énergie de liaison, la diffusivité entre les sites de piégeage a toujours une valeur très basse (pièges irréversibles), tandis que pour les pièges à faible énergie de liaison, l'équilibre d'Oriani prédit des concentrations très faibles dans les sites de piégeage ; dans les deux cas, il est presque nul. Cependant, le concept de proximité ou d'éloignement devrait être explicitement inclus lors de la discussion sur la question de savoir s'il existe ou non un flux entre les pièges. (Diaz 2017)

I.11. Particularité et usage du Cr-Mo

Le Cr et le Mo sont des éléments alphas conduisant à la stabilité de la phase α . De plus, ces éléments sont carburigènes : ils modifient les carbures précipités à l'état d'équilibre. En leur présence, le carbone ne précipite plus sous forme de carbures de fer, mais sous d'autres espèces. De nombreux travaux ont donné lieu à la caractérisation de l'état de

précipitation dans des systèmes Fe-C-Cr ou Fe-C-Mo par microscopie électronique à transmission [Shtansky97, Hetzner08, Frappart2011]

Ce phénomène est observé dans les aciers au carbone ou faiblement alliés, quand ils sont exposés à des températures élevées, sous pression élevée d'hydrogène, pendant de longues périodes.

L'hydrogène réagit avec le carbone, provenant d'une décomposition des carbures, pour former du méthane. Cela se traduit par une décarburation en surface du métal et la croissance de cavités contenant du méthane. Les caractéristiques mécaniques et la ténacité du matériau sont réduites. Une augmentation de la résistance du matériau à ce phénomène peut être obtenue par l'ajout d'éléments qui stabilisent les carbures (Cr, Mo, V...). Les limites de résistance des aciers au phénomène d'attaque par l'hydrogène sont données par les courbes de Nelson [API. - American Petroleum Institute. Publication no 941] [Brasse ,2000]

Ce phénomène est observé dans les aciers au carbone ou faiblement alliés, quand ils sont exposés à des températures élevées, sous pression élevée d'hydrogène, pendant de longues périodes.

L'hydrogène réagit avec le carbone, provenant d'une décomposition des carbures, pour former du méthane. Cela se traduit par une décarburation en surface du métal et la croissance de cavités contenant du méthane. Les caractéristiques mécaniques et la ténacité du matériau sont réduites. Une augmentation de la résistance du matériau à ce phénomène peut être obtenue par l'ajout d'éléments qui stabilisent les carbures (Cr, Mo, V...). Les limites de résistance des aciers au phénomène d'attaque par l'hydrogène sont données par les courbes de Nelson [API. - American Petroleum Institute. Publication no 941]. [Brasse ,2000]

I.12. Pourquoi ces éléments d'alliage Cr-Mo-V

1.12.1. Influence des éléments d'alliage:

1.12.1.1. Chrome:

Cet élément est utilisé dans la plupart des aciers à outils, en quantité allant de 0.5 à 17%. Le chrome joue un rôle essentiel dans l'augmentation de la trempabilité. Il forme des carbures qui participent à la résistance à l'abrasion et s'opposent au grossissement de grains lors de l'austénitisation. Il provoque, par ailleurs, un certain retard à l'adoucissement lors du revenu, ce qui améliore la résistance à chaud. Il entraîne également une très forte réduction de l'oxydation à haute température.

I.12.1.2. Molybdène

Ils se comportent comme le Tungstène. Les aciers au molybdène présentent par rapport aux aciers au tungstène, un certain nombre d'avantages et d'inconvénients :

Avantage :

- Meilleure ductilité et densité plus faible.

Inconvénients :

- Plus grande sensibilité à la décarburation et au phénomène d'oxydation catastrophique pour des maintiens entre 1000 et 1100°C, plus grande sensibilité au phénomène de surchauffe, d'où réduction de la fourchette de température de trempe.

I.12.1.3. Vanadium

Utiliser essentiellement comme élément générateur de carbures. C'est un élément d'alliage important dans les aciers rapides pour l'obtention d'une bonne dureté à chaud et une bonne résistance à l'usure.

De petites additions voisines de 0.2% en masse sont très efficaces pour éviter le grossissement du grain lors du traitement thermique. Le Vanadium est rarement utilisé seul dans les aciers à outils, mais la plupart du temps en association avec le chrome, molybdène et le tungstène. La teneur en vanadium est étroitement associée à la teneur en carbone. Pour chaque 1% de vanadium ajouté, il faut augmenter la teneur massive en carbone de 0.25%. Des additions de vanadium trop importantes entraînent des problèmes de trempabilité, et des additions de carbone trop importantes entraînent des difficultés de forgeage.

I.12.1.4. Addition de pièges

L'hydrogène peut être piégé par les défauts microstructuraux (inclusions, carbures, dislocations...). Les pièges ont parfois un effet néfaste dans la mesure où ils peuvent être des sites privilégiés d'amorçage des fissures (cas du phénomène de HIC). Le piégeage peut également avoir un effet favorable.

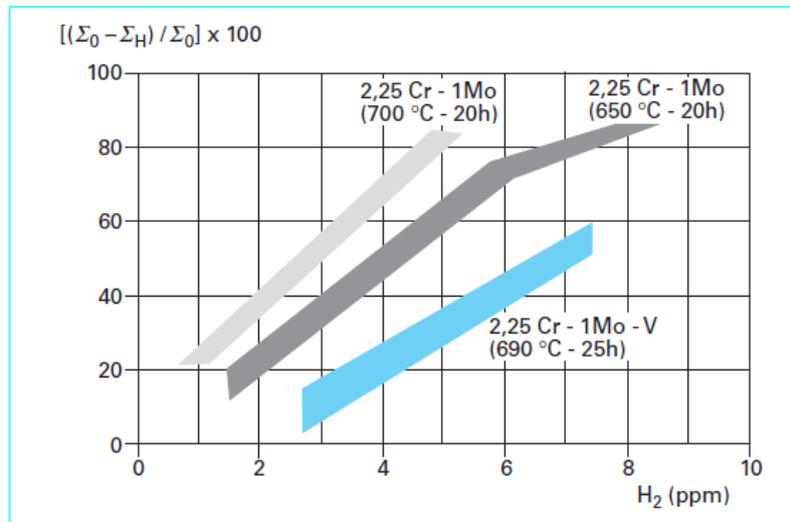


Figure I. 5 Influence de la teneur en hydrogène sur le taux de réduction de striction pour différents aciers à 2,25Cr. Influence favorable d'un ajout de 0,25 %V [Brass, 1983]

Une illustration du rôle favorable du piégeage de l'hydrogène est donnée par les aciers Cr-Mo-V utilisés pour la fabrication de réacteurs d'hydrotraitement. Au cours de ces dix dernières années, afin de répondre à la demande de l'industrie du raffinage, les sidérurgistes ont dû faire évoluer l'acier 2,25 Cr - 1 Mo (12 Cr - Mo 9.10 de l'EN 10028-3) jusqu'alors largement utilisé pour la fabrication d'appareils fonctionnant à température élevée sous pression d'hydrogène [Bocquet P.1995].

Pour faire face aux exigences de plus en plus sévères (température, pression, taille des appareils), des nuances modifiées avec addition de vanadium ont été proposées (2,25 Cr - 1 Mo - 0,25 V ; 3 Cr - 1 Mo - 0,25 V). L'ajout de vanadium avait pour objectif premier une augmentation des caractéristiques mécaniques, de la résistance au fluage et de la trempabilité. Les essais de résistance à la fragilisation par l'hydrogène effectués sur ces matériaux dans des conditions représentatives des conditions de fonctionnement des appareils (pré-chargement en hydrogène à haute température) ont révélé une faible sensibilité malgré des caractéristiques mécaniques élevées (figure I.6). L'étude des cinétiques de dégazage de l'hydrogène à différentes températures a montré des capacités de piégeage irréversible de l'hydrogène à des températures jusqu'à 300 °C (figure I.5) [Brass, 1983] [Charbonnier et al 1985] [Coudreuse et Bocquet, 1995]. L'hydrogène fortement piégé lors du refroidissement des éprouvettes ou du réacteur permet de réduire considérablement l'activité en hydrogène mobile responsable de la fragilisation

Des examens en microscopie électronique en transmission ont permis de montrer que ce piégeage était dû à une forte densité de dislocations associée à une fine précipitation de carbures.

Il est important de signaler que, dans ce cas, l'effet favorable du piégeage est dû au fait que la source d'hydrogène est limitée : hydrogène présent dans le matériau avant refroidissement. Le même matériau testé dans des conditions d'apport continu d'hydrogène (H_2S humide, par exemple) ne présenterait pas le même type de comportement. Après saturation de pièges profonds, il y aurait équilibre entre l'activité externe en hydrogène et l'activité interne en hydrogène, et donc risque de fragilisation. La répartition homogène des pièges dans la microstructure est également un facteur favorable.

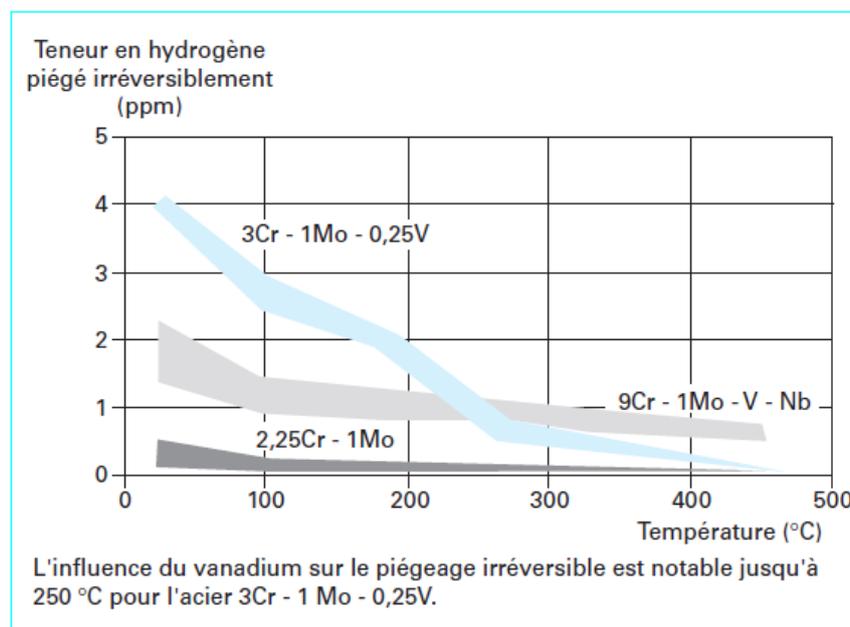


Figure I. 6 Comparaison des teneurs en hydrogène piégées irréversiblement à différentes températures pour différents aciers au Cr-Mo [Bocquet P.1995].

I.13. Effet sur les propriétés mécaniques

La présence d'hydrogène affecte le comportement mécanique du fer et de l'acier, principalement en réduisant la ductilité (fragilisation), en diminuant la contrainte de fracture et en provoquant une défaillance tardive et fragile dans des conditions appropriées.

Apparemment, la limite d'élasticité de l'acier n'est pas affectée par la présence d'hydrogène, ce qui suggère que la fragilisation par l'hydrogène ne se produit pas tant que la limite d'élasticité n'est pas dépassée. Le comportement des aciers à ultra-haute résistance dans lesquels une fissuration sous contrainte de l'hydrogène s'est produite à des contraintes appliquées aussi basses que 5% de la limite ultime nominale :

- La résistance à la traction peut amener à remettre en question ce concept. Cependant, des mesures très précises de la limite élastique ces dernières années ont montré qu'une déformation permanente du plastique pouvait se produire dans les aciers trempés à des niveaux de contrainte appliqués très bas ;
- Limites comprises entre 20 000 et 60 000 psi pour une grande variété d'aciers).

Divers enquêteurs ont montré que charger un acier avec de l'hydrogène n'affectait pas sa dureté. La présence d'hydrogène n'a souvent aucun effet sur la résistance à la traction ultime des aciers de moindre résistance, mais dans le cas des aciers à haute résistance, la résistance à la traction est réduite. Si, en raison d'une ductilité réduite, l'acier ne peut pas atteindre sa résistance à la traction maximale avant que la résistance à la rupture ne soit atteinte, la résistance à la traction ultime est abaissée. La présence d'hydrogène a abaissé la résistance à la traction de certains matériaux à 17% de la valeur du matériau correspondant non chargé.

Dans tous les cas, la résistance à la rupture, ou contrainte de rupture réelle, est réduite par l'hydrogène. Les courbes contrainte-déformation vraie de l'acier contenant de l'hydrogène et de l'acier exempt d'hydrogène peuvent être superposées jusqu'au point de fracture du Matériel. L'allongement et la réduction de surface sont réduits avec l'augmentation de la teneur en hydrogène. Cependant, tant qu'aucun dommage permanent ne s'est produit, la ductilité peut être rétablie par un traitement de vieillissement approprié avant les essais de traction. Dans les aciers à ultra haute résistance, une petite quantité d'hydrogène suffit pour réduire la ductilité à zéro.

L'endurance à la température a un effet marqué sur la fragilisation due à l'hydrogène. La fragilisation par l'hydrogène est la plus grave aux températures intermédiaires (généralement comprise entre -150 F et +210 F). L'hydrogène a relativement peu d'effet à la température de l'azote liquide (-321 F) ou inférieure, et pour les aciers ferritiques ou martensitiques, l'effet diminue rapidement lorsque la température augmente au-dessus de la température ambiante. Il est bien établi que la fragilisation par l'hydrogène est sensible à la vitesse de déformation. À des taux de contrainte très élevés, de l'ordre de 10 po / po. / min et plus, les effets fragilisant de l'hydrogène dans l'acier sont minimisés. Ainsi, la fragilisation par l'hydrogène est un phénomène à faible taux de contrainte. Cet effet de vitesse de déformation indique pourquoi la fragilisation par l'hydrogène de l'acier n'a pas été détectée lors des essais de choc. En général, les valeurs de choc de l'acier en barre à encoche ne sont

pas réduites par la présence d'hydrogène dans l'acier, et généralement, la température de transition au choc n'est pratiquement pas affectée. Si les propriétés d'impact sont affectées, cela signifie que des dommages permanents ont été causés.

Habituellement, avec les réactions de fragilisation plus classiques dans les aciers ferritiques et martensitiques, la perte de ductilité est augmentée par une vitesse de déformation accrue et par des températures plus basses. Cependant, la fragilisation par l'hydrogène est favorisée par les faibles taux de contrainte et les températures moyennes.

La fragilisation par l'hydrogène se manifeste souvent sous la forme de défaillances tardives et fragiles qui se caractérisent par une rupture sous des charges appliquées relativement faibles, souvent dans des conditions statiques après avoir déjà résisté à des charges beaucoup plus élevées et à des conditions dynamiques. Les pièces en acier traité thermiquement à haute résistance sont particulièrement sensibles aux défaillances fragiles et tardives induites par l'hydrogène.

La microstructure d'un acier martensitique est complexe. Son état métallurgique peut être aisément modifié par une succession de traitements thermiques tels que le traitement d'austénitisation, le type de trempe (eau, huile) et les traitements de revenu. Le choix des paramètres de la procédure de fabrication influera sur les dimensions des grains et les densités de chacune des hétérogénéités (dislocations, précipitations, lacunes). Ces variations procureront à l'acier des différences de propriétés mécaniques, de résistance à la corrosion sous contrainte et plus particulièrement à la FPH. De nombreuses recherches ont montré l'influence de la métallurgie des aciers sur leur susceptibilité à la fragilisation par l'hydrogène (Craig77, Lупpo91, Luu96, Parvathavarthini99, Pound98, Banerjee01, Parvathavarthini01, Serna05, Ramunni06, Kim08, Olden08, Park08).

1.13.1. Essai de rupture de disques sous pression

Cet essai [Fidelle (J.P.) 1982], développé au CEA par J.P. Fidelle, a pour objectif de se rapprocher des conditions pour lesquelles il peut y avoir rupture de pièces exposées à des pressions élevées d'hydrogène gazeux. Le principe de l'essai de rupture de disque (diamètre 58 mm, épaisseur 0,75 mm) est de comparer les pressions de rupture obtenues sous pression croissante d'hélium (pHe) ou de l'hydrogène. On admet en général que si le rapport est < 2 , le matériau peut être utilisé en présence d'hydrogène gazeux. Cet essai est notamment utilisé pour la sélection des aciers en vue de la fabrication de bouteilles de stockage ou de transport

d'hydrogène [Barthelemy (H.). 1993]. Des variantes de l'essai de rupture de disque ont été développées : essais en température, essais de fatigue [Fidelle, 1982]

1.13.2. Effet d'un état de contrainte/déformation

En thermodynamique, la contrainte modifie le potentiel chimique μ de l'espèce en solution (en l'occurrence l'hydrogène ici) par la relation

$$\mu = \mu_0 + RT \ln(C_0) - \sigma_m \bar{V}_H$$

σ_m est la pression hydrostatique, \bar{V}_H est le volume partiel de l'hydrogène et C_0 et μ_0 sont respectivement la concentration d'hydrogène et le potentiel chimique sans contrainte (Li66, Beck66). Des données ont été obtenues dans le domaine d'élasticité pour le fer α , les aciers, le palladium et des alliages binaires palladium-argent (De Kazincsy55, Beck66, Wriedt70, Bockris71, Kirchheim86, Hwang94), ce qui vient confirmer la théorie thermodynamique des corps contraints selon la relation déduite de l'expression du potentiel chimique $\mu_0 + m H \ln(C_0/C) = (\sigma V)/RT$. Malgré ces études, la gamme de contrainte hydrostatique reste généralement inférieure à 50MPa.

Dans le cas des aciers martensitiques, les limites d'élasticité sont plus élevées. Cependant, comme nous l'avons souligné précédemment, de fortes densités de dislocations ou de lacunes résiduelles sont toujours présentes dans ce type d'alliage (Schafler97, Morito03, Pesicka04, Frappart10). C'est pourquoi leur influence sur la diffusion, la concentration et le piégeage peuvent également être discutés dans le domaine de l'élasticité mais également dans celui de la plasticité. De nombreux travaux ont été réalisés dans le domaine de la plasticité en présence de dislocations mobiles (Kurkela79, Kumnick80, Kang89, Huang03, Brass06, Robertson09). Cet aspect est fondamental lorsqu'il s'agit de cerner l'origine de la rupture du matériau dû à l'hydrogène (Delafosse01, Eliaz02, Wang07, Kim08, Liu08).

A partir de ces nombreuses interprétations, plusieurs modèles ont été longuement discutés dans la littérature comme par exemple les modèles HELP (hydrogen-enhanced localized plasticity)(Birnbaum94, Magnin96, Robertson09) ou HEDE (hydrogen-enhanced decohesion) (Troiano60, Vehoff83). Plus récemment, Kirchheim a proposé un modèle qui fédère les deux précédentes approches. Nommé «defactant concept», celui-ci est une vision «universelle» de la ségrégation de l'hydrogène sur des hétérogénéités conduisant à la réduction de leur énergie de formation (Kirchheim07, Kirchheim09, Barnoush10). Ainsi, ces

mécanismes soulèvent des discussions quant à la diffusion et à la ségrégation de l'hydrogène en présence de dislocations, moteurs de la plasticité (Frappart 2014)

1.13.3. Essais de traction

L'influence de l'hydrogène sur les caractéristiques mécaniques peut être étudiée à partir d'essais de traction. Là encore les essais de traction sont réalisés sur des éprouvettes préchargées en hydrogène ou au cours du chargement.

L'essai le plus simple consiste à comparer les caractéristiques de traction d'une éprouvette chargée en hydrogène et d'une éprouvette de référence non chargée. On choisit généralement comme critère d'endommagement l'indice de fragilisation **F %** donné par la relation

$$F\% = [(\Sigma_0 - \Sigma_H)/\Sigma_0] \times 100 \quad \text{Eq.I. 17}$$

Avec :

Σ_0 Striction d'une éprouvette sans hydrogène,

Σ_H Striction d'une éprouvette chargée en hydrogène.

La fragilisation est d'autant plus importante que l'indice F % est élevé.

Les essais de traction sur éprouvettes préchargées sont réalisés aux vitesses classiquement mises en œuvre pour les essais de traction, de façon à limiter tout dégazage pendant la durée de l'essai.

Les essais de traction peuvent être réalisés en présence d'hydrogène gazeux [ASTM Standard Practice G142-96. – Standard], sous chargement électrolytique, en environnement H₂S humide ou dans toute condition susceptible d'introduire de l'hydrogène dans le matériau. Lorsque les essais sont réalisés simultanément au chargement en hydrogène, le paramètre vitesse de déformation devient essentiel : plus la vitesse de déformation est faible plus l'endommagement est important. Les vitesses de déformation utilisées peuvent être abaissées jusqu'à 10⁻⁶ voire 10⁻⁷ s⁻¹

Rappelons ici que les phénomènes de fragilisation par l'hydrogène étant favorisés par les faibles vitesses de déformation, ils ne sont pas mis en évidence par les essais de rupture par choc (hormis les cas où il y a un endommagement irréversible préalable).

Les essais de traction lente sont en général très sévères. Il est très difficile d'extrapoler les résultats à un comportement en service. Ils sont cependant intéressants dans la mesure où ils peuvent permettre une comparaison rapide (comparativement aux essais de ruptures différées) de matériaux.

Il a été constaté expérimentalement que les valeurs du module d'élasticité (E) et de la limite d'élasticité (YS) de la plupart des matériaux ne sont pas affectées par l'hydrogène. Cependant, la résistance à la traction ultime (UTS), obtenue à partir d'échantillons de traction lisses, peut être légèrement ou au mieux modérément réduite si les matériaux sont jugés très sensibles à la fragilisation par l'hydrogène. Par conséquent, le rapport entre E, UTS et YS provenant d'échantillons en traction lisses ne doit pas être utilisé comme bon indicateur de l'indice HEE. Les propriétés de traction fondamentales qui sont fortement affectées par l'hydrogène peuvent être répertoriées comme étant le NTS pour un échantillon de traction à entaille vive, ou RA et EL pour un échantillon de traction lisse.

Expérimentalement, il a été constaté que la tendance générale des effets de l'hydrogène sur le rapport NTS, mesurée à partir d'un échantillon entaillé, est bien corrélée avec le rapport RA et le rapport EL, mesurés à partir d'un échantillon lisse soumis au test SSR.

1.13.4. Essais de mécanique de la rupture

Les essais de mécanique de la rupture ont pour but de déterminer les conditions pour lesquelles un défaut pourra se propager dans une structure (détermination des tailles de défauts critiques, détermination de niveaux de contraintes acceptables). Les essais de la mécanique de la rupture ont été étendus à l'étude des phénomènes de fragilisation par l'hydrogène ou de corrosion sous contrainte.

I.13.4.1. Mécanique élastique linéaire de la rupture

Trois méthodes peuvent être utilisées :

- Méthode à charge constante ;
- Méthode à ouverture constante ;
- Méthode sous chargement croissant.

I.13.4.2. La méthode à charge constante

Cette approche dans son principe des essais de rupture différée dans la mesure où une charge constante est appliquée à une éprouvette de mécanique de la rupture, de type compact (CT). La valeur seuil K_{ISH} ou K_{IH} est calculée à partir de la charge maximale ne conduisant pas à la rupture en un temps donné .

I.13.4.3. La méthode à ouverture constante

Cette méthode est particulièrement intéressante dans la mesure où elle ne nécessite pas l'utilisation d'un appareillage complexe. L'ouverture est imposée soit à l'aide d'une vis (éprouvette WOL) [Novak (S.R.) 1969], soit à l'aide d'un coin [Nace standard TM 01-77-90 (method d).nace.] (éprouvette DCB).

L'ouverture initiale est choisie pour que la valeur KI initiale soit supérieure à la valeur K_{IH} supposée. Lorsque la fissure se propage, le facteur d'intensité de contrainte diminue. La grandeur K_{IH} est calculée à l'arrêt de la fissure

I.13.4.4. La méthode sous chargement croissant

Cette méthode consiste à détecter le début de propagation de la fissure lors d'un chargement continu [Landes, 1982]. L'amorçage de la fissuration est déterminé par comparaison des courbes effort/ouverture d'une éprouvette de référence et de l'éprouvette testée dans le milieu d'essai ou par utilisation des techniques de potentiel électrique.

Dans le cas de matériaux ductiles, la mécanique linéaire élastique de la rupture ne peut être appliquée et il faut alors faire appel aux concepts de la mécanique élasto-plastique de la rupture. Les essais de type CTOD sur éprouvettes chargées en hydrogène sont, par exemple, utilisés pour étudier la ténacité d'aciers pour appareil à pression fonctionnant en présence d' H_2S humide. Les concepts de la courbe R ou de l'intégrale J sont également appliqués [Coudreuse, 1994]. Comme pour les essais de traction il y a une influence importante de la vitesse de déformation sur les résultats obtenus.

1.13.5. Coefficient de diffusion

La Figure I.5, est une compilation de données disponibles dans la littérature concernant les aciers à faibles taux de carbone (Luppo91, Mendez02, Brass04, Dietzel06, Lunarska08, Dong09, Frappart 2011) et d'autres plus alliés (Parvathavarthini99). Cette figure représente l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la limite d'élasticité $\sigma_{0,2\%}$ et de la contrainte maximale σ_m . Une courbe en cloche est observable avec une augmentation rapide du coefficient de diffusion apparent, un maximum à $D_{app}=4.10^{-10}m^2/s$ et enfin une diminution plus lente. Pour des temps ou des températures de revenu importants, des transformations de phase ou la présence d'un taux important d'austénite ($\alpha \rightarrow \gamma$) peuvent être à l'origine des faibles valeurs de D_{app} . Ensuite, au regard d'une plus faible densité d'hétérogénéités microstructurales due à une meilleure restauration lors du revenu (aciers ferritiques, aciers martensitiques avec des températures de revenu plus importantes), le

coefficient de diffusion apparent tendrait vers la valeur du coefficient de diffusion de l'hydrogène dans le fer α' . Cependant, la présence de défauts (comprendre «piège de l'hydrogène») telles que des interfaces (Morito06²), des précipités, des dislocations (Pesicka03), va engendrer une augmentation de la limite d'élasticité ce qui est généralement le cas pour les aciers à haute limite d'élasticité lorsque la température et/ou le temps de revenu sont faibles. L'augmentation du nombre de sites de piégeage (notion que nous décrirons plus tard) est d'autant plus importante que la limite d'élasticité est grande. Ce phénomène est à rapprocher des modèles de piégeage de l'hydrogène (McNabb63, Oriani70, Krom00) et de travaux expérimentaux (Wei05) pour lesquels le coefficient de diffusion tend à diminuer avec l'augmentation du nombre de sites de piégeage. Dans le cas des aciers contenant davantage d'éléments d'alliage (Parvathavarthini99), l'état métallurgique (précipitation, taille de grains, densité de dislocations) est considérablement modifié. L'augmentation du nombre de sites de piégeage et la diminution du nombre de sites interstitiels disponibles expliqueraient naturellement une translation du coefficient de diffusion vers des valeurs plus faibles.

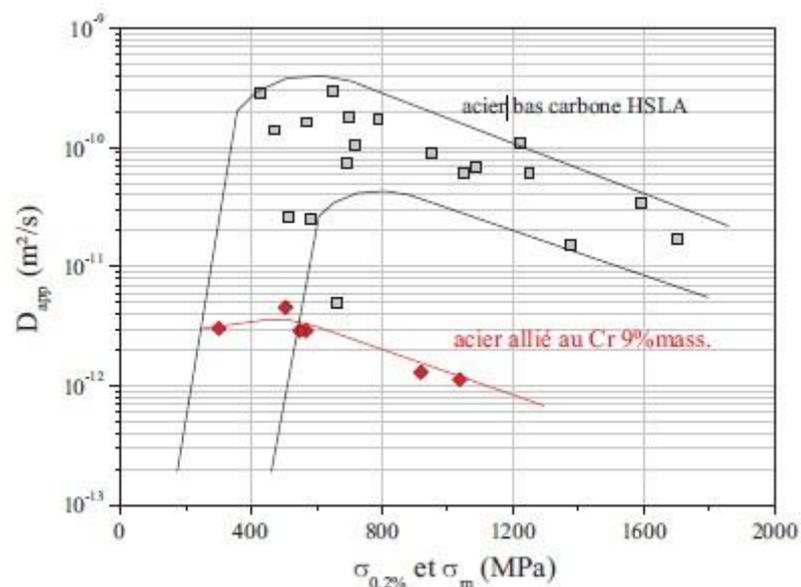


Figure I. 7 Evolution du coefficient de diffusion en fonction de la limite d'élasticité et de la contrainte maximale dans le cas d'aciers bas carbone ou faiblement alliés Faible cycle de fatigue (Luppo91, Parvathavarthini99, Mendez02, Brass04, Dietzel06, Lunarska08, Dong09).

La fissuration propre à la FPH a généralement une apparence fragile à l'échelle macroscopique, bien qu'à l'échelle microscopique elle puisse être associée à différents mécanismes de rupture, fragiles, inter-granulaires ou trans-granulaires par quasi-clivage, ductiles, coalescence de micro-vides ou déchirure plastique (Aránzazu 2008). Le micro-

mécanisme de la rupture opératoire varie en fonction de l'environnement agressif et de la microstructure (Álvarez 1998).

Tableau I. 3 Effets de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des aciers [Amaro et al, 2014]

Propriété mécanique	Effet de l'hydrogène
Striction	Eprouvette lisse: diminution jusqu'à 50% Eprouvette entaillé: diminution jusqu'à 80%
Résistance à la traction	N'a pas été affecté significativement
Limite élastique	N'a pas été affecté significativement
Ténacité	Elle diminue avec l'augmentation de la pression H.
Taux de croissance des fissures de fatigue	Influencé par la pression de H, la fréquence, le rapport de charge R et la pureté du gaz H.
Micro mécanisme de fracture	Changement de coalescence en fracture intergranulaire, en passant par un clivage transgranulaire.

I.14. Synthèse

L'étude de la fragilisation par l'hydrogène représente un défi majeur dans le domaine de l'industrie dans l'intérêt de prolonger la durée de vie des pièces métallique en service.

Différents paramètres, intrinsèques ou extrinsèques, peuvent influencer la FPH. La résistance des aciers à la FPH dépend surtout de leur composition chimique, résistance mécanique et microstructure, ce dernier terme intégrant la présence de zones de ségrégation et d'inclusions non métalliques. Ces différents paramètres intrinsèques au métal sont bien sûr étroitement liés.

La variabilité de microstructures permet de conférer à chaque alliage des propriétés mécaniques particulières en élasticité et en plasticité

La présence d'hydrogène affecte le comportement mécanique du fer et de l'acier, principalement en réduisant la ductilité, en diminuant la contrainte de fracture et en provoquant une défaillance tardive et fragile d'après la littérature ce dernier n'a aucun effet ni sur la dureté ni sur la résistance à la traction.

Bibliographical Review

The study of hydrogen embrittlement represents a major challenge for industry in the interest of extending the life of metal parts in service.

Different parameters, intrinsic or extrinsic, can influence the HE. The resistance of steels to HPT depends mainly on their chemical composition, mechanical strength and microstructure, the latter term including the presence of segregation zones and non-metallic inclusions. These different parameters intrinsic to the metal are of course closely related.

The variability of microstructures allows each alloy to have particular mechanical properties in terms of elasticity and plasticity.

The presence of hydrogen affects the mechanical behavior of iron and steel, mainly by reducing ductility, reducing fracture stress and causing late and brittle failure according to the literature it has no effect on either hardness or tensile strength.

Références bibliographique

Abdelali Oudriss(2012) thèse de doctorat en sciences des matériaux Influence des hétérogénéités métallurgiques sur les processus de diffusion et de piégeage de l'hydrogène dans le nickel , Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, Université de La Rochelle

Barnoush, A. (2011). Hydrogen embrittlement. Saarland University

Beachem C. D., (1972) Metall. Mater. Trans. B, 3 pp 441-455.

Beachem, C. (1972). A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen - embrittlement). Metallurgical transactions, 3(2), 441-455.

Beachem, D, (1972)Metall. Mater. Trans. B, 3 pp 441-455.

Bernstein, I. (1970). The role of hydrogen in the embrittlement of iron and steel. Materials Science and Engineering, 6(1), 1-19.

Birnbaum Colloque C5. J. d. Physique. 10 (1989). 397-401.

Birnbaum, H. K., & Sofronis, P. (1994). Hydrogen-enhanced localized plasticity—a mechanism for hydrogen-related fracture. Materials Science and Engineering: A,176(1–2), 191-202. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0921-5093\(94\)90975-X](http://dx.doi.org/10.1016/0921-5093(94)90975-X).

Birnbaum, H. K., & Sofronis, P. (1994). Hydrogen-enhanced localized plasticity—a mechanism for hydrogen-related fracture. Materials Science and Engineering: A,176(1–2), 191-202. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0921-5093\(94\)90975-X](http://dx.doi.org/10.1016/0921-5093(94)90975-X).

- Birnbaum, H.K, (1989) Mechanisms of Hydrogen related Fracture of Metals, Technical Report of Office of naval Research 18p.
- Birnbaum, H.K, Ladna, B, et Kimura, A (1988) ,hydrogen Segregation And Diffusion At Grain Boundaries pp C5-397 - C5-401
DOI: <https://doi.org/10.1051/jphyscol:1988546>
- Birnbaum, H.K, Sofronis, P,(1994) Mater. Sci. Eng. A 176 pp191-202.
- Bueno, A. H. S., Moreira, E. D., & Gomes, J. A. C. P. (2014). Evaluation of stress corrosion cracking and hydrogen embrittlement in an API grade steel. *Engineering Failure Analysis*, 36, 423-431. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.engfailanal.2013.11.012>
- Carr N. Z. et McLellan R. B., (2004) *Acta Mater.*, 52 pp 3273-3293.
- Dayal, R. K., & Parvathavarthini, N. (2003) Hydrogen embrittlement in power plant steels. *Sadhana*, 28(3), 431-451. doi: 10.1007/bf02706442
- Delafosse et T. Magnin, (2001) *Eng. Fract. Mech.*, 68 7693-729.
- Delafosse, D., & Magnin, T. (2001). Hydrogen induced plasticity in stress corrosion cracking of engineering systems. *Engineering Fracture Mechanics*, 68(6), 693-729. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0013-7944\(00\)00121-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0013-7944(00)00121-1).
- Devanathan, M., Stachurski, Z., & Beck, W. (1963). A technique for the evaluation of hydrogen embrittlement characteristics of electroplating baths. *Journal of the electrochemical society*, 110(8), 886-890.
DOI: 10.1016/B978-044489875-3/50018-1
- Eastman J., Matsumoto T., Narita N., Heubaum F., Birnbaum H.K.(1981) Hydrogen effects in nickel - embrittlement or enhanced ductility, *MetallSoc of AIME*, pp.397-409. H. K. Colloque, Wei et K. Tsuzaki, (2006)*Metall. Trans. A*, 37 pp 331-353.
Forum, Vol. 202, Trans. Tech. Publications (1996) 176p
- Fukai J, (2005), *The Metal-Hydrogen System: Basic Bulk Properties*, Springer, Heidelberg 497p
- Fukai, J. (2003) *Alloys Compd.*, 356-357 pp 263-269
- Gangloff, R. P., & Somerday, B. P. (2012). *Gaseous Hydrogen Embrittlement of Materials in Energy Technologies: Mechanisms, modelling and future developments (Vol. 2)*: Elsevier.
- H. C. Rogers (1968) *Hydrogen Embrittlement of Metals* Vol. 159, Issue 3819, pp. 1057-1064 doi:10.1126/science.159.3819.1057
- H. Vehoff, W. Rothe, *Acta Metall.* 31 (1983) 1781-1793
- H.K. Birnbaum, P. Sofronis, *Mater. Sci. Eng. A* 176 (1994) 191-202q

Hirth J.P, (1980)Metall. Trans. A 11A pp861-890

Hirth, J. (1980). Effects of hydrogen on the properties of iron and steel. Metallurgical Transactions A, 11(6), 861-890. doi: 10.1007/BF02654700.

Hondros, E.D, Seah, M.P, Siegfried Hofmann, Pavel Lejček,(1996) interfacial and Surface Microchemistry ,in book: Physical Metallurgy

I.M Robertson, H.K. Birnbaum, P. Sofronis, Dislocations in Solids, Vol.15,

Edited by

Jiang, D., & Carter, E. A. (2004). First principles assessment of ideal fracture energies of materials with mobile impurities: implications for hydrogen embrittlement of metals. Acta Materialia, 52(16), 4801-4807.

John Hirth, Hereford, AZ, USA (2009) 249-293

Kittel, J., Smanio, V., Fregonese, M., Garnier, L., & Lefebvre, X. (2010). Hydrogen induced cracking (HIC) testing of low alloy steel in sour environment: Impact of time of exposure on the extent of damage. Corrosion Science, 52(4), 1386-1392. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.corsci.2009.11.044>.

Kittel, J., Smanio, V., Fregonese, M., Garnier, L., & Lefebvre, X. (2010). Hydrogen induced cracking (HIC) testing of low alloy steel in sour environment: Impact of time of exposure on the extent of damage. Corrosion Science, 52(4), 1386-1392. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.corsci.2009.11.044>.

Louthan M.R . Caskey .G.R. Donovan J. A Rawl D.E ; (1972) hydrogen embrittlement by hydrogen, Materials Science and Engineering, Volume 10, Pages 357-368 [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(72\)90109-7](https://doi.org/10.1016/0025-5416(72)90109-7).

Lynch P., (1979) Metals Forum, 2 pp 189-200.

Lynch R.P, (1979)Metals Forum, 2 pp 189-200

Lynch S. P. (1988), Acta Metall., 36 pp 2639-2661.

Lynch,S. P. (2007) Progress towards understanding mechanisms of hydrogen embrittlement and stress corrosion cracking 074931-0749355

Lynch,S. P. (2007) Progress towards understanding mechanisms of hydrogen embrittlement and stress corrosion cracking 074931-0749355.

Moon, K. M., Lee, M. H., Kim, K. J., Kim, J. G., & Kim, S. J. (2003). A study on the post weld heat treatment effect to mechanical properties and hydrogen embrittlement for heating affected zone of a RE 36 steel. Corrosion Science and Technology, 2(6), 283-288.

Oriani A et Josephic P. H. , (1979)Acta Metall., 27 pp 997-1005.

- Oriani A et Josephic P. H., (1972) *Scr. Metall.*, 6pp 681-688.
- Oriani A et Josephic P. H., (1974)*Acta Metall.*, 22 pp 1065-1074.
- Oriani A, (1970) *Acta Metall.*, 18 pp 147-157.
- Oriani, (1990) *Environment-Induced Cracking of Metals*, Houston, NACE, pp 439-448.
- Oriani, R. A. (1970). The diffusion and trapping of hydrogen in steel. *Acta Metallurgica*, 18(1), 147-157. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160\(70\)90078-7](http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160(70)90078-7)
- Oriani, R. A. (1978). Hydrogen Embrittlement of Steels. *Annual Review of Materials Science*, 8(1), 327-357. doi: doi:10.1146/annurev.ms.08.080178.001551
- Oriani, R. A. (1978). Hydrogen Embrittlement of Steels. *Annual Review of Materials Science*, 8(1), 327-357. doi: doi:10.1146/annurev.ms.08.080178.001551
- Oriani, R. A. (1983). The Hardening and Softening Induced by Hydrogen in Carbon Steels. In R. M. Latanision & J. R. Pickens (Eds.), *Atomistics of Fracture* (pp. 795-798): Springer US.
- Oriani, R. A., & Josephic, P. H. (1974). Equilibrium aspects of hydrogen-induced cracking of steels. *Acta Metallurgica*, 22(9), 1065-1074. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160\(74\)90061-3](http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160(74)90061-3).
- Petch N. J. and Stables P., (1952) *Nature* 169, 842
- Petch N. J., (1956) *Philos. Mag.*, 1 pp 331-337.
- Petch N. J.,(1956) *Philos. Mag.*, 1 pp 331-337.
- Petchet J., Stables P., (1952) *Nature*, 169 pp 842-843.
- Petchet J., Stables P., (1952) *Nature*, 169 pp 842-843.
- R. Troiano, *Trans. Am. Soc. Met.*, 52 (1960) 54-80
- Shipilov, S. A., & Le May, I. (2006). Structural integrity of aging buried pipelines having cathodic protection. *Engineering Failure Analysis*, 13(7), 1159-1176. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.engfailanal.2005.07.008>
- Sofronis, P., & Mc Meeking, R. M. (1989). Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 37(3), 317-350.
- Sofronis, Y. liang et N. Aravas, *Eur. J. Mech. (2001) A/Solids*, 20 pp 857- 872.
- T. Magnin, *Advances in Corrosion-Deformation Interactions*, Materials Science Troiano,R. (1960) *Trans. Am. Soc. Met.*, 52 , 54-80.
- Troiano,R. (1966) *Trans. ASM*, 52 ,54-80

Zapffe (C.) et Sims (C.T.). (1941)– Hydrogen embrittlement, internal stress and defects in steel. Trans. AIME, 145 p. 225-71

Zhenqian, Z., Zhiling, T., Chun, Y., & Shuangping, L. (2015). Failure analysis of vessel propeller bolts under fastening stress and cathode protection environment. *Engineering Failure Analysis*, 57, 129-136. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.engfailanal.2015.07.013>

**CHAPITRE II : APPLICATION DES METHODES
STOCHASTIQUES AU PHENOMENE DE DIFFUSION
DE L'HYDROGENE**

II.1. Analyse probabiliste de la désorption de l'hydrogène par la méthode de Monte Carlo

II.1.1. Introduction

L'approche probabiliste aborde les problèmes de manière totalement différente, en postulant a priori le caractère aléatoire des quantités impliquées dans les phénomènes étudiés et dans les modèles comportementaux utilisés pour décrire ces phénomènes. Dans une telle approche, toutes les incertitudes associées au modèle, aux paramètres, aux facteurs humains, etc... en déduisent des résultats eux-mêmes affectés par des incertitudes. Ainsi, quelle que soit la nature du problème étudié, les résultats sont exprimés sous une forme homogène, à savoir la probabilité d'occurrence de certains événements.

La méthode la plus simple et la plus robuste pour évaluer la propagation d'incertitude au travers d'un modèle est la méthode de Monte-Carlo. Celle-ci consiste à effectuer des tirages aléatoires des variables d'entrée du modèle en très grand nombre, à évaluer la ou les réponses du modèle pour chacun de ces tirages ensuite effectuer des traitements statistiques sur ces réponses. Pour les ordres de grandeur de probabilité de rupture intéressant les décideurs, il n'est pas rare d'avoir à envisager cent mille ou un million de tirages (échantillons).

Il existe bien d'autres modèles statistiques tel que (Au et Beck, 2001), la méthode de simulation par Subset qui réduit énormément le nombre de simulations. Un autre type de méthodes permet de substituer au modèle déterministe un méta-modèle analytique. C'est le cas de la méthode des surfaces de réponse stochastique par collocation CSRSSM (Isukapalli et al. 1998, Isukapalli 1999, Phoon et Huang 2007, Huang et al. 2009, Li et al. 2010, Mollon et al. 2011). Le calage du méta-modèle s'effectue à partir d'un nombre réduit d'appels au modèle d'origine et l'application de la méthode de Monte-Carlo peut ensuite s'effectuer sur le méta-modèle pour un coût de calcul très faible.

II.1.2. Un petit saut dans le temps

Il existe donc deux types de problèmes qui peuvent être traités par la méthode de Monte-Carlo: les problèmes probabilistes qui ont un comportement aléatoire et les problèmes déterministes, qui n'en ont pas.

Pour ce qui est du cas probabiliste, il consiste à observer le comportement d'une série de nombres aléatoires qui simule le fonctionnement du problème réel et à en tirer les solutions.

Pour le cas déterministe, le système étudié est complètement défini et on peut en principe prévoir son évolution, cependant certains paramètres du problème peuvent être traités comme s'il s'agissait de variables aléatoires. Le problème déterministe devient alors probabiliste et résoluble de façon numérique. On parle alors d'estimation de "Monte-Carlo" ou d'une approche de "MC élaborée".

La dénomination de méthode de "Monte-Carlo" date des alentours de 1944. Des chercheurs isolés ont cependant utilisé bien avant des méthodes statistiques du même genre: par exemple, Hall pour la détermination expérimentale de la vitesse de la lumière (1873), ou Kelvin dans une discussion de l'équation de Boltzmann (1901), la véritable utilisation des méthodes de Monte-Carlo commença avec les recherches sur la bombe atomique.

Au cours de l'immédiat après-guerre, Von Neumann, Fermi et Ulam avertirent le public scientifique des possibilités d'application de la méthode de Monte-Carlo (par exemple, pour l'approximation des valeurs propres de l'équation de Schrödinger). L'étude systématique en fut faite par Harris et Hermann Khan en 1948. Après une éclipse due à une utilisation trop intensive pendant les années 1950, la méthode de Monte-Carlo est revenue en faveur pour de nombreux problèmes: en sciences physiques, en sciences économiques, pour des prévisions électorales, etc., bref, partout où il est fructueux d'employer des procédés de simulation

La méthode de Monte-Carlo est un moyen très efficace qui consiste à contourner les problèmes mathématiques et physiques les plus complexes. Elle trouve ses applications dans des domaines variés dont voici quelques exemples :

- Problèmes neutronique liés à la bombe atomique (ou tout autre problème de la même famille),
- Calculs d'intégrales ou de paramètres divers de variables aléatoires (finance, risque),
- Résolution d'équations elliptiques ou paraboliques,
- Résolution de systèmes linéaires ,
- Résolution de problèmes d'optimisation (recherche opérationnelle, gestion de projets),
- Création de tests statistiques (Anderson-Darling, Kolmogorov, Levene, Brown-Forsythe, etc.).

II.1.3. Analyse stochastique en éléments finis

Des approches en éléments finis, utilisées pour des milieux aléatoires peuvent être classées par catégorie dans deux classes principales,

- La méthode des éléments finis stochastique (SFEM) : dans ces approches des propriétés statistiques des variables aléatoires sont établies dans les équations des éléments finis (Baecher et Ingra, 1981 ; Righetti et Harrop-Williams, 1988; Brenner, 1991 ; Yeh et Rahman, 1998).
- Les simulations de Monte-Carlo en utilisant l'analyse en éléments finis déterministes avec données stochastiques.

II.1.4. Incertitudes liées à l'imperfection des modèles rhéologiques

Il est à noter que les résultats des calculs sont également affectés par de nombreuses incertitudes, parmi lesquelles, l'imperfection des lois de comportement (les modèles) et l'imprécision des calculs réalisés sur la base de ces modèles.

II.2. Approche probabiliste

II.2.1. Principe général

L'approche probabiliste aborde les problèmes d'une manière toute différente, en postulant à priori le caractère aléatoire des grandeurs qui interviennent dans les phénomènes étudiés et dans les modèles de comportement utilisés pour décrire ces phénomènes.

Dans une telle approche, on quantifie toutes les incertitudes attachées au modèle, aux paramètres, aux facteurs humains, etc. On en déduit ensuite des résultats qui sont eux-mêmes affectés d'incertitudes. On obtient ainsi, quelle que soit la nature du problème étudié, des résultats exprimés sous une forme homogène, à savoir la probabilité de voir se produire certains évènements.

Dans le modèle de calcul (*Figure II.1*, les données et les résultats sont affectés d'incertitudes. Ce ne sont plus des grandeurs uniques bien définies, mais des variables aléatoires.

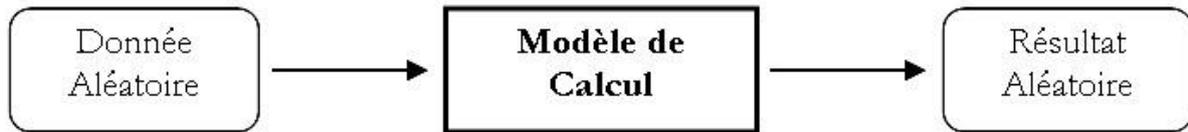


Figure II. 1 Schéma général de calcul par un modèle de type probabiliste

La nature exacte du modèle n'est pas précisée à ce stade, pas plus que les méthodes de calcul particulières qui devront être mises en œuvre pour utiliser des quantités aléatoires.

II.2.2. Principales étapes de l'approche probabiliste

Le schéma général de calcul par un modèle de type probabiliste a déjà été présenté plus haut (figure.6). On va maintenant examiner de plus près quelques-unes des nombreuses questions formulées et à les résoudre :

- Comment obtenir les données du problème sous la forme de variables aléatoires de manière à obtenir une représentation assez fidèle de la réalité ?
- Comment choisir rationnellement un modèle de calcul utilisable dans le contexte probabiliste ?
- Comment transmettre, au travers du modèle de calcul, le caractère aléatoire (les variations) de ces données ?
- Comment enfin utiliser les résultats, eux-aussi exprimés sous la forme de variables aléatoires, pour obtenir les réponses recherchées ?

II.2.3. Modélisation des données aléatoires

Dans le domaine de la mécanique des sols, la quantification des paramètres d'entrée (données) s'appuie souvent sur un traitement statistique de données expérimentales. En l'absence d'un nombre suffisant de mesures relatives au matériau étudié, on s'appuie sur des valeurs considérées comme vraisemblables sur la base de considérations plus générales, mécaniques et autres.

En réalité donc, les paramètres étudiés seraient considérés à priori comme des variables aléatoires, c'est-à-dire affectés d'une incertitude, mais dont on pourra pour certains négliger la dispersion.

Notons dès à présent que le traitement statistique dont il est question est presque toujours un simple processus, qui traite les données comme des valeurs extraites au hasard d'une seule population d'éléments, tous de nature identique.

Ce traitement peut aussi être un processus plus complexe, prenant en compte la position dans l'espace des valeurs mesurées. De telles grandeurs sont ainsi définies à la fois par :

- La valeur du paramètre mesuré,
- La position dans l'espace où ce paramètre a été mesuré (ou la position dans L'espace où l'échantillon étudié en laboratoire a été prélevé),
- Ces grandeurs forment un champ aléatoire, (Houmadi 2011).

II.2.4. Choix du modèle et incertitudes associées

La quantification des incertitudes liées aux paramètres est difficile à estimer à ce stade du travail, c'est le cas aussi des incertitudes liées aux modèles. Même si cet aspect n'est pas très développé dans cette étude, il ne sera pas ignoré. Il en sera tenu compte à travers la variation des paramètres qui sont considérés comme des variables aléatoires. Il en sera de même pour les résultats des modèles. Dans l'approche qui nous concerne, la prédominance est donnée à la variabilité spatiale des paramètres plutôt qu'aux incertitudes qui régissent la diffusion de l'hydrogène.

Pour cela, on adoptera, comme dans une approche classique, des modèles de calcul déterministes ayant fait leurs preuves. La principale différence consistera dans le type de données à introduire et le type de résultats obtenus, qui seront tous des variables aléatoires. Les calculs ainsi menés sont des calculs probabilistes.

II.2.5. Calculs probabilistes

Une étape cruciale de la mise en œuvre des méthodes de calcul probabiliste est celle qui consiste à transférer, à travers le modèle de calcul (déterministe) choisi, les incertitudes des différents paramètres. Ces derniers sont en effet des variables aléatoires, et les méthodes rigoureuses permettant de réaliser des calculs exacts sur de telles variables ne s'appliquent qu'à quelques cas extrêmement simples sans aucun intérêt pratique.

II.2.6. Exploitation des résultats

Les résultats obtenus par les calculs probabilistes sont donc des variables aléatoires. Mais les problèmes posés aux ingénieurs ont besoin de réponses qui ne peuvent pas être facilement exprimées sous cette forme probabiliste. Ainsi, il est nécessaire de pouvoir formuler des réponses à des interrogations précises, qui pourraient être entre autres :

- La probabilité de voir se produire un événement bien déterminé, comme la dégradation d'un dispositif mécanique vulnérable à l'hydrogène qui peut causer la rupture prématurée ;
- Les formes, dimensions et caractéristiques des matériaux de l'ouvrage ou de la partie de l'ouvrage conduisant à un niveau de probabilité de rupture ou de mise hors service choisi à priori (calcul de dimensionnement) ;
- Connaissant les coûts respectifs des opérations d'élaboration, d'entretiens et ceux entraînés par un éventuel accident, on peut optimiser le dimensionnement en terme économique en recherchant la solution conduisant au coût global minimal, etc.

II.3. Discrétisation de l'aléa en champs aléatoires

Les variables modélisées sur un milieu continu sont susceptibles de suivre des variations spatiales. Ceci est particulièrement vrai pour les propriétés de sol, puisque celles-ci dépendent des aléas de l'histoire géologique du site. Pour tenir compte de la dépendance spatiale de ces variables, il est possible de les modéliser sous forme de champs aléatoires. Un tel champ est défini par une distribution statistique et par une fonction d'autocorrélation. Il s'agit d'une variable continue, définie dans un espace de deux ou trois dimensions dans la plupart des applications géotechniques. Selon le modèle déterministe dans lequel ce champ est injecté il peut être possible de conserver sa continuité, mais il est parfois nécessaire de le discrétiser.

C'est le cas par exemple lorsque l'on souhaite appliquer un champ à un modèle numérique maillé, auquel cas il faut appliquer une valeur discrète de la variable en question à chaque maille (Youssef Abdel Massih 2007). Pour générer un champ aléatoire, plusieurs méthodes existent dans la littérature. Certaines d'entre elles se proposent d'appliquer directement une valeur discrète à certains points, ou d'effectuer un « moyennage » spatial sur un élément (Vanmarcke et Grigoriou 1983). D'autres méthodes utilisent des développements en séries pour représenter un champ aléatoire par une série de variables aléatoires. Parmi ces méthodes, on peut citer la méthode spectrale (Shinozuka et Deodatis 1991), la méthode d'expansion en séries orthogonales (OSE), ou la méthode de discrétisation par estimation linéaire optimale (EOLE) (Sudret Der Kiureghian 2000). La méthode d'expansion en séries de Karhunen-Loeve (KL) appartient à cette même famille, et a été choisie pour la génération des champs utilisés dans ce manuscrit.

II.4. Fiabilité en génie mécanique

En général, la fiabilité est définie comme étant l'aptitude d'un dispositif à fonctionner sans défaillance, dans des conditions de fonctionnement et d'environnement données, pendant un temps donné. Lorsqu'on quantifie ce paramètre, on exprime cette aptitude par la probabilité d'atteindre un temps t sans défaillance. On notera par exemple : fiabilité (1000heures)=98%, ce qui sous-entend que dans 2% des cas, on doit accepter qu'une défaillance survienne avant le temps spécifié.

Afin de pouvoir remplir cette tâche, la reconnaissance des dangers est de toute première importance. Ensuite, l'ingénieur doit analyser et évaluer les dangers pour prendre des décisions quant aux mesures à prendre pour garantir la sécurité et la fiabilité exigées.

II.5. Définitions et enjeux du calcul en fiabilité

II.5.1. Nature du problème et définitions

On définit ci-dessous les points essentiels du calcul de la fiabilité d'un composant d'un système mécanique (Lemaire et al, 1996 ; Mohamed, 1993 ; Sudret and D.Kiureghian, 2000 ; Sellier et Mebarki, 1994 ; Goyet, 1994 ; Ditlevsen, 1997). Le composant en fiabilité des structures est un ensemble constitué d'une partie d'un élément structurel (section d'une poutre par exemple), d'une fonction d'état associée (plastification, flambement, ...) et d'un comportement post-ruine (élasto-plastique parfait, ...). Ce dernier élément est notamment utile en fiabilité système (compétition entre plusieurs fonctions d'état de plusieurs composants).

On définit alors :

- Variables de base : appelées aussi variables de conception, elles sont les composantes d'un vecteur X . Ce sont des variables aléatoires d'entrée d'un calcul de fiabilité.
- Le coefficient de sécurité F : $F = R/S$
- R : Résistance à la rupture
- S : Sollicitation appliquée

R et S : sont en pratique deux variables aléatoires (M_R, σ_R) ; (M_S, σ_S)

- Fonction d'état limite : appelée aussi fonction de performance et notée $G(X)$, son intersection avec l'hyperplan des variables défini par la frontière entre le domaine de sécurité

Ds et le domaine de ruine Df. Une valeur positive de G signifie que les réalisations des variables aléatoires conduisent à une situation de sécurité et une valeur négative signifie qu'elles conduisent à une situation de défaillance. La courbe représentant $G(X) = 0$ est appelée courbe d'état limite. Lorsque la fonction d'état s'écrit sous la forme de la différence d'une résistance et d'une sollicitation, $G = R - S$, elle est appelée marge de sécurité et est notée M.

- Point de conception : appelé aussi le point de rupture le plus probable ou point critique, il est le point de la zone de rupture qui a la plus grande probabilité d'occurrence lors d'une réalisation des variables aléatoires. Il est le point de la frontière entre le domaine de sécurité et le domaine de rupture, le plus proche de l'origine dans l'espace des variables centrées réduites.

II.5.1.1. Probabilité de rupture (ruine)

C'est la probabilité d'avoir une valeur négative d'une réalisation de la fonction d'état $G(X) = R(X) - S(X)$, elle est notée Pf (probability of failure).

On a donc :

$$Pf = P((R - S) \leq 0) \quad \text{Eq.II. 1}$$

Avec: $G(X) = R(X) - S(X)$

$$Pf = P(G(X) \leq 0) \quad \text{Eq.II. 2}$$

Une représentation en trois dimensions de la zone de rupture par rapport à la distribution de probabilité conjointe de R et S est représentée dans la figure II.2. A condition de connaître les lois de distribution de S et R. Si R et S suivent une loi normale ce qui implique que la marge de sécurité $G=R-S$ suit la même loi.

Il existe différentes techniques permettant d'estimer la probabilité de rupture. Cette dernière peut être déterminée par des méthodes directes de simulation ou par l'intermédiaire de l'indice de fiabilité.

Les trois voies principales de calcul de la probabilité de ruine Pf sont :

- Calcul par l'intermédiaire de l'indice de fiabilité β . Les méthodes FORM et SORM sont utilisées pour permettre d'évaluer β .
- Échantillonnage par tirage d'importance (Importance Sampling, IS), elle permet de cibler les tirages des variables de base X_i autour du point de conception. Cela permet de réaliser de meilleures approximations de Pf pour des échantillons de taille limitée.

- Technique de simulation directe par la méthode de Monte-Carlo (MCS).

Cette méthode est la plus précise mais elle est très coûteuse. Le calcul d'une probabilité de ruine approchée P_f se fait en mesurant le nombre d'échantillon (composé de N tirages de variables de base) des réalisations situées à l'intérieur du domaine de rupture sur le nombre total des réalisations. Notons qu'en faisant tendre le nombre de l'échantillon vers l'infini, la probabilité de défaillance approchée P_f tend vers la probabilité de défaillance réelle P_f .

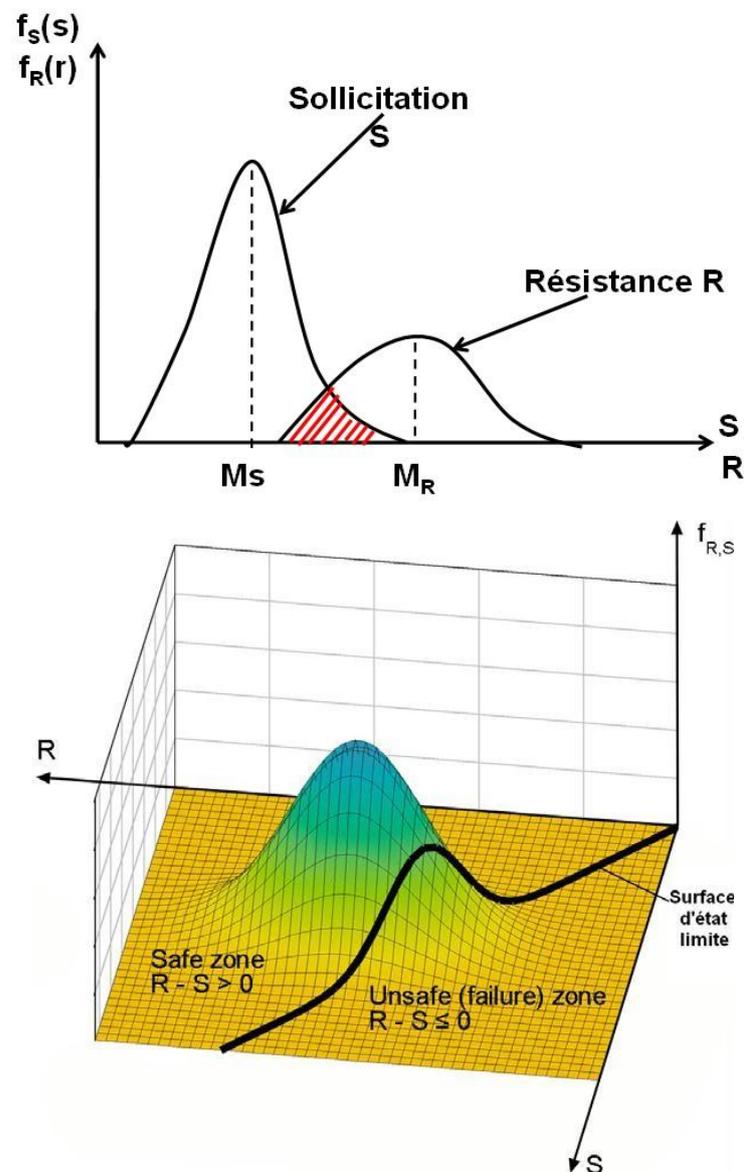


Figure II. 2 Distribution des probabilités de S et de R [Houmadi,2011]

II.6. Les Réseaux de Neurones Artificielles

II.6.1. Introduction

La présente section commence par une présentation sur le principe de calcul neuronal. Celle-ci est suivie de quelques indications générales sur la méthodologie de développement d'un réseau de neurones. Ceci va permettre d'introduire les notions de base. Ensuite, nous présentons les réseaux de neurones les plus courants dans l'ingénierie. La comparaison de diverses architectures neuronales nous permettra de justifier le choix du type de réseau de neurones que nous avons utilisé pour notre application. Nous indiquons alors les algorithmes qui nous semblent les plus appropriés compte tenu de notre application et de ses contraintes.

Lors de l'émergence d'une nouvelle technique, l'ingénieur se demande naturellement en quoi elle peut lui être utile ? Si elle est dotée d'un nom plus métaphorique que scientifique dit-t-il ?

– ce qui est évidemment le cas pour les réseaux de neurones – dont le nom est lié fortement à la biologie. Ainsi, techniquement parlant, les réseaux de neurones artificiels (RNA) sont de nature purement mathématique et statistique. Leurs applications se situent dans des domaines qui n'ont généralement aucun rapport avec la neurobiologie.

Le domaine de calcul par réseaux de neurones a mûri au cours de la dernière décennie et a trouvé de nombreuses applications industrielles. Les réseaux de neurones sont maintenant couramment utilisés dans les processus de contrôle, de fabrication, de contrôle de la qualité, de la conception du produit, de l'analyse financière, de la détection des fraudes, de l'approbation du prêt, de la reconnaissance vocale et d'exploration de données. Le logiciel anti-virus sur votre ordinateur utilise probablement des réseaux neuronaux pour reconnaître les instructions qui peuvent être liées aux virus. Lorsque vous achetez un produit sur internet un réseau de neurones analyse vos habitudes d'achat et prévoit quels produits pourraient vous intéresser (Poulton, 2001).

II.6.2. Réseaux de neurones : définitions et propriétés

Les réseaux de neurones artificiels ou réseaux connexionnistes sont fondés sur des modèles qui tentent de mimer les cellules du cerveau humain et leurs interconnexions. Le but, d'un point de vue global, est d'exécuter des calculs complexes et de trouver, par

apprentissage, une relation non linéaire entre des données numériques et des paramètres (Derras, 2011).

II.6.3. Neurone biologique

Le cerveau humain possède deux hémisphères latéraux reliées par le corps calleux et d'autres ponts-axones, il pèse moins de deux kilogrammes et contient mille milliards de cellules, dont 100 milliards sont des neurones constitués en réseaux.

Le neurone biologique (figure.III.1) est une cellule vivante spécialisée dans le traitement des signaux électriques. Les neurones sont reliés entre eux par des liaisons appelées axones. Ces axones vont eux-mêmes jouer un rôle important dans le comportement logique de l'ensemble.

Ils conduisent les signaux électriques de la sortie d'un neurone vers l'entrée (synapse) d'un autre neurone. Les neurones font une sommation des signaux reçus en entrée et en fonction du résultat obtenu vont fournir un courant en sortie (Sorin et al, 2001). Le neurone est le processeur élémentaire du cerveau. Chaque neurone traite l'information qui lui parvient localement, puis transmet aux autres neurones qui lui sont connectés l'information qu'il a traitée. Ces cellules peuvent apprendre en changeant l'intensité de leurs connexions avec d'autres cellules ou détruire ou même créer de nouvelles connexions. Elles peuvent aussi changer leur(s) règle(s) de traitement de l'information. Ce processus de changement est appelé apprentissage et joue un rôle fondamental dans le comportement du neurone (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).

Les neurones sont des cellules nerveuses décomposables en 4 parties principales (II.1). Les dendrites, sur lesquelles les autres cellules entrent en contact synaptique : c'est par les dendrites que se fait la réception des signaux. Le corps de la cellule ou noyau, est l'unité de traitement. L'axone est la partie où passent les messages accumulés dans le corps de la cellule. Enfin, à la sortie du neurone on trouve les synapses, par lesquelles la cellule communique avec d'autres neurones, ce sont des points de connexion par où passent les signaux de la cellule (Derras, 2011).

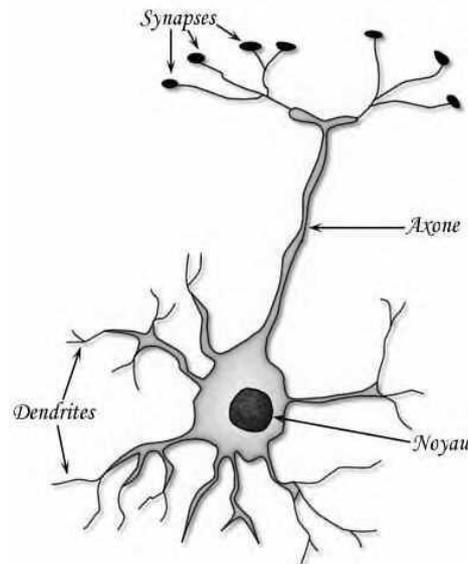


Figure II. 1 Exemple de neurone biologique [Jayet, 2002]

Un neurone stimulé envoie des impulsions électriques ou potentielles d'action, à d'autres neurones. Ces impulsions se propagent le long de l'axone unique de la cellule. Au point de contact entre neurones, les synapses, ces impulsions sont converties en signaux chimiques.

Quand l'accumulation des excitations atteint un certain seuil d'activation, le neurone engendre un potentiel d'action, pendant une durée de 1ms. Le neurone émettant le signal est appelé le neurone pré-synaptique et celui recevant ce signal, neurone post-synaptique (Derras, 2011)

II.6.4. Application des réseaux de neurones en ingénierie

II.6.4.1. Reconnaissance de forme : la lecture automatique des codes postaux

La reconnaissance de caractère est sans doute le domaine où les réseaux de neurones ont acquis leurs lettres de noblesse et ont prouvé qu'ils constituent des alternatives fiables. En effet, si le traitement automatique du courrier à dresser, à dactylographier ou à imprimer est relativement simple, celui du courrier à adresse manuscrite est beaucoup plus complexe en raison de la variabilité des styles d'écriture. Aussi est-il bien évident qu'il vaut mieux corriger une erreur de tri de la machine par un opérateur humain que de faire le tri par ce dernier. Sachant bien que la machine a pour rôle soit d'identifier le code soit d'indiquer qu'elle n'est pas en mesure de l'identifier (Aissa Mamoune, 2009).

Les premières études pour la résolution de ce problème ont été établies au laboratoire AT&T, en utilisant un réseau de neurones connu sous le nom de LeTNet (LeCun, 1991) qui utilise une représentation par pixel (Aissa Mamoune ,2009).

En 1992, Knerr a proposé une approche très différente qui consiste à réaliser un prétraitement de l'image plus avancé afin d'extraire des caractéristiques discriminantes qui permettent d'utiliser une classification relativement simple (Aissa Mamoune, 2009). Le tableau ci-dessous représente l'amélioration de l'utilisation de la représentation par caractéristique à celle par pixels.

Agroalimentaire:	Analyse automatisée des odeurs dans le traitement de la nourriture (date de péremption). Contrôle de cuisson dans un four micro-ondes.
Assurance de qualité:	Classification des défauts de production. Vérification de pneumatiques. Contrôle de qualité de fabrication des microprocesseurs.
Détection des fraudes:	Dans l'usage des cartes de crédit. Dans l'usage des chèques. Vérification des signatures. Détection d'identité par l'analyse des habitudes des dépenses
Finance:	Prévision de bourse. Gestions des fonds de pension.
Gestion des documents et imprimés	Reconnaissance des caractères. Reconnaissance des visages. Reconnaissance des empreintes digitales. Reconnaissance des formes en général. Traitement automatisé des formulaires.
Marketing:	Serveur pour le placement des annonces «intelligents ». Optimisation des stratégies de marché. Prévision des demandes de transport par avion. Prévision de la consommation des boissons gazeuses. Sélection des usagers qui recevront des catalogues.
Médecine et santé:	Analyse des protéines pour le développement des drogues. Prédiction de la gravité de la maladie et l'usage des
	Ressources de l'hôpital.
Production	Contrôle de coulée continue. Contrôle des lamineurs. Contrôle et réduction de déchets dans la production des films photographiques.

Science et ingénierie:	Routage optimisé des circuits. Evaluation du timbre du voix et traitement d'audio. Spectroscopie et analyse des processus chimiques. Prévision de temps quantitative. Pilotage des véhicules autonomes.
Transport:	Détection des défauts dans le métro de London.

II.6.4.2. Application des réseaux de neurones en génie mécanique

- **La prédiction des vibrations induites par des défauts combinés (Younes Debbah, et al 2015)**

L'excitation du système expérimental par un défaut combiné (désalignement - balourd) et par un recueil du RMS (écart quadratique par rapport à une moyenne, g) comme valeur caractéristique pertinente pour l'état du système. Le sous-ensemble de caractéristiques obtenu est ainsi injecté dans le réseau de neurones. Ce dernier peut être fondé sur un processus de détection permettant une modélisation pour déterminer l'état courant du système, car La maintenance du matériels, qu'elle soit définie par le constructeur, l'exploitant ou les deux, est un facteur prépondérant dans la qualité des matériels et la détermination des coûts d'exploitation. L'utilisation des données mesurées sert pour l'apprentissage et la vérification de la performance du réseau de neurones. La procédure était faite en trois étapes, la phase de mesure, ensuite la phase d'apprentissage et enfin la phase de prédiction, Younes Debbah et al, 2015)

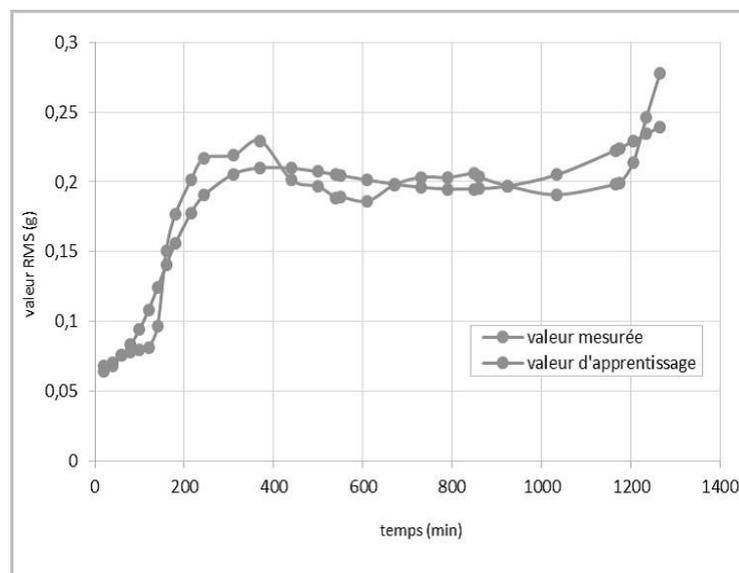


Figure II. 3 comparaison entre la courbe de la valeur RMS mesurée et la courbe d'apprentissage du réseau de neurones (Debbah et al, 2015)

La figure II.4 représente deux courbes pour le même système mécanique. La première est celle de la valeur RMS mesurée et la deuxième est celle de la valeur RMS d'apprentissage. Cette étude a montré une grande similitude entre les résultats expérimentaux et les calculs par le modèle des réseaux de neurones.

Compte tenu de la complexité de la relation entre les entrées et les sorties, les résultats obtenus sont très encourageants et satisfaisants. Ils conduisent à la compréhension qu'une bonne prédiction nécessite l'utilisation d'un nombre optimal de neurones dans la couche cachée ainsi qu'un nombre suffisant de données.

II.6.4.5. Neurone formel

Le neurone formel est l'unité élémentaire des réseaux de neurones artificiels dans lesquels il est associé à ses semblables pour calculer des fonctions arbitrairement complexes . Par définition un neurone formel (figure.II.2) est une fonction algébrique non linéaire, paramétrée, à valeurs bornées (Dreyfus, 2008; Derras, 2011). Il peut être caractérisé par :

- a) La nature de ses entrées ($x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n$), qui peuvent être les entrées du réseau ou les sorties d'autres neurones du même réseau,
- b) La fonction d'entrée totale définissant le prétraitement (combinaison linéaire) effectué sur les entrées comme $\sum W_i \cdot x_i + b$, dont W_i est le poids synaptique attaché à l'entrée i et le b désigne le seuil d'activation (biais),
- c) Sa fonction d'activation, ou d'état f , définissant l'état interne du neurone en fonction de son entrée totale. Cette fonction peut prendre plusieurs formes (Tableau.II.1)
- d) Sa fonction de sortie calculant la sortie du neurone en fonction de son état d'activation, Tableau : II. 1. Formes et graphes de quelques fonctions d'activation usuelles.

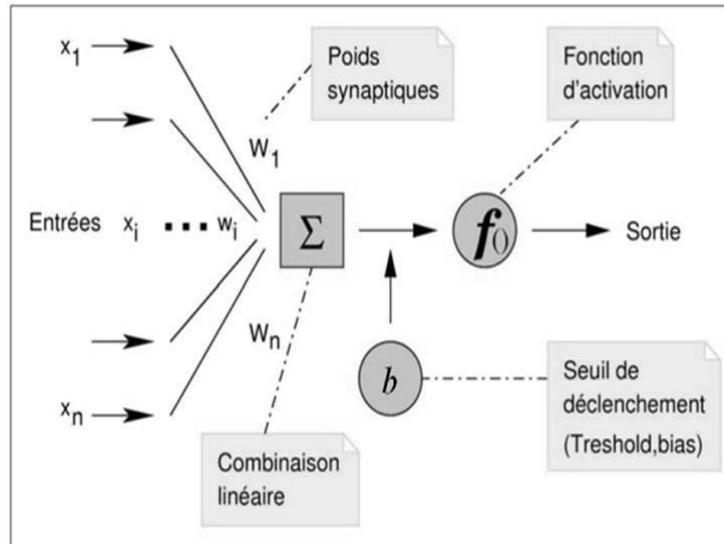


Figure II. 2 Structure générale du neurone formel (Derras, 2011)

II.6.4.6. Réseaux de neurones formels

Les réseaux de neurones artificiels regroupent en réseaux un certain nombre de neurones formels connectés entre eux de diverses manières. Un réseau est défini par sa topologie, qui représente le type de connexion existant entre les divers neurones du réseau, par la fonction d'activation qui le caractérise et par les méthodes d'apprentissage utilisées pour trouver une relation non linéaire optimale par approximation entre les variables d'entrées et de sorties (Derras, 2011).

II.6.4.7. Typologies (Types de réseaux de neurones)

Les neurones trouvent leur utilité quand ils sont associés entre eux pour obtenir un réseau. Les réseaux de neurones se divisent du point de vue architecture de fonctionnement en deux classes majeures (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010) :

- **Les réseaux à couches**

Les neurones sont groupés en couches, il n'y a pas d'interconnexion entre les neurones d'une même couche (figure II.6).

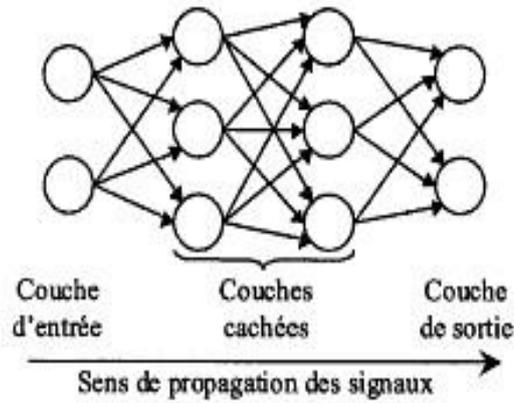


Figure II. 4 Exemple d'un réseau de neurones avec une structure en couches (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010)

- **Les réseaux récurrents :**

Des boucles fermées de connexion et de transmission d'informations entre tous les neurones sont permises (figure II.7).

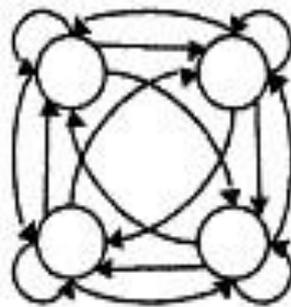


Figure II. 5 Exemple d'un réseau de neurones récurrent (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).

Nous pouvons aussi trouver des réseaux récurrents à couches, avec des boucles entre les couches (combinaison des deux architectures précédentes, (figure II.8).

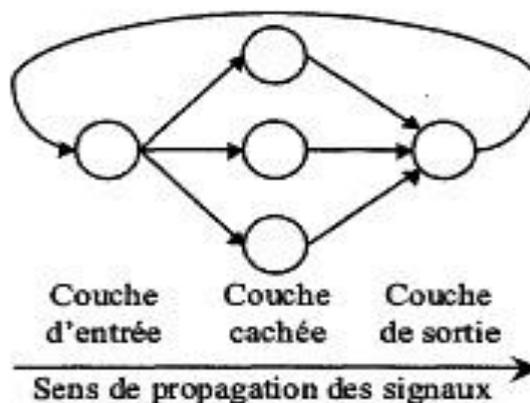


Figure II. 6 Exemple d'un réseau de neurones en couches avec une récurrence entre couches (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010)

Les neurones sont connectés entre eux de diverses manières. (a) Réseaux multicouche à connexions Totales, (b) à connexions locales, (c) réseau à connexions complexes et (d) réseau multicouche à connexions récurrentes (dynamique) (Figure II.9), (Derras, 2011).

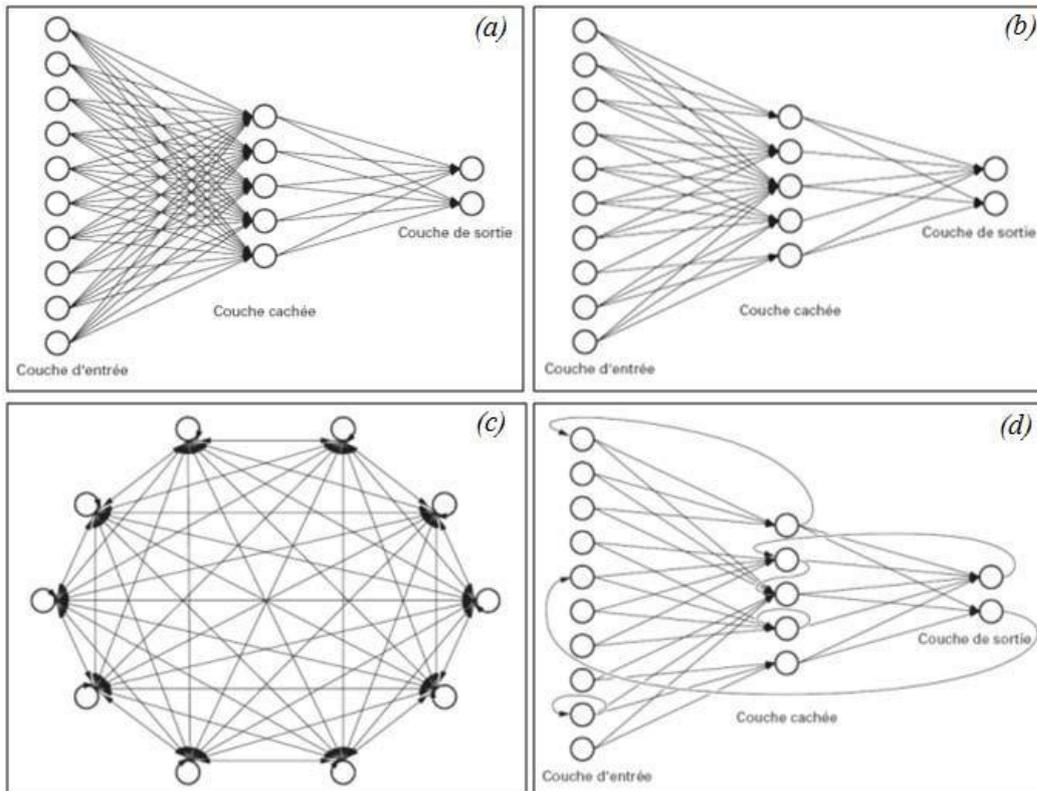


Figure II. 7 Typologies des RNA (Sorin et al, 2001)

De la figure II.9 on peut distinguer deux familles de réseaux de neurones : non bouclés ou statiques (a) et (b) et bouclés (dynamiques) (c) et (d), (Derras, 2011).

- **Réseaux de neurones statiques (réseaux non bouclés)**

L'exemple le plus simple de réseau de neurones statique est donné par le perceptron multicouche ; chaque couche contenant un ou plusieurs neurones. Afin d'illustrer ces propos, voici le rôle de chacune des couches dans un perceptron à trois couches. La première couche est appelée couche d'entrée. Elle recevra les données source que l'on veut utiliser pour l'analyse. Dans le cas de cette étude, cette couche recevra les paramètres des différentes températures de revenu. Sa taille est donc directement déterminée par le nombre de variables d'entrées.

La deuxième couche est la couche cachée. Dans cette couche, les fonctions d'activation sont en général non linéaires. Le choix de sa taille (nombre de neurones) n'est pas automatique et doit être ajusté. Il sera souvent préférable pour obtenir la taille optimale, d'essayer le plus de tailles possibles.

La troisième couche est appelée couche de sortie. Elle donne le résultat obtenu après compilation par le réseau des données entrée dans la première couche. Sa taille est directement déterminée par le nombre de variables dont on a besoin en sortie (Derras, 2011).

- **Réseaux de neurones dynamiques ou réseaux bouclés (ou récurrents)**

L'architecture la plus générale, pour un réseau de neurones, est celle des «réseaux bouclés», dont le graphe des connexions est cyclique : lorsque l'on se déplace dans le réseau en suivant le sens des connexions, il est possible de trouver au moins un chemin qui revient à son point de départ ; un tel chemin est désigné sous le terme de «cycle». La sortie d'un neurone du réseau peut donc être fonction d'elle-même ; ceci n'est évidemment concevable que si la notion de temps est explicitement prise en considération (Dreyfus, 2008).

II.7. Soft computing techniques

Selon Zadeh (1994), le soft computing est un ensemble de méthodologies visant à exploiter la tolérance dans l'imprécision et l'incertitude pour atteindre une bonne robustesse de la solution à faible coût. Ses composants principaux sont la logique floue, la neuro-informatique et le raisonnement de probabilité (Gesoglu et al, 2009). Cette étude implique l'application du réseau de neurones dont les initiales sont ANN, pour la modélisation de la concentration en hydrogène dans le métal en raison de son effet d'affaiblissement. Le contexte ANN sera brièvement expliqué dans les parties suivantes.

Le réseau de neurones est un concept fonctionnel de la structure neuronale biologique du système nerveux central. Il consiste en un grand nombre d'unités de traitement simples, appelées neurones, connectées les unes aux autres pour former un réseau de connexions dense (Uysal et Tanyildizi, 2012). Les connexions sont associées à des poids appelés poids synaptiques. Chaque signal voyageant le long d'une connexion est multiplié par le poids de la connexion. Les poids pourraient être renouvelés pour toutes les nouvelles données. Ayant réalisé une base de données actuelle, la formation du système est

facilement mise à jour avec les données qui seront obtenues ultérieurement (Birinci et al, 2001- Gesoglu 2007). Cette méthode imite le comportement du cerveau humain (Haykin, 2009). Le concept de réseaux de neurones a été introduit par Mc Culloch et Pitts (1943). Ils ont mis au point pour la première fois le premier modèle de réseau de neurones et mis au point un modèle cellulaire similaire à celui de la figure II.3 (Arbib, 1995 - Mukherjee et Biswas, 1997).

Tableau II. 1 Comparaison entre la représentation par pixel et celle par caractéristiques (Dreyfus G et al. 2002)

	Taux de chiffres bien classés	Taux de rejet	Taux d'exemples mal classés
Représentation par pixels	70,9 %	28,1 %	1 %
Représentation par caractéristiques	90,3 %	8,7 %	1 %

II.7.1. Contrôle non-destructif : la détection de défauts dans des rails

En 1997, l'INRETS (Institut National de la recherche sur les transports et leurs sécurités en FRANCE), a développé une approche pour la RATP qui consiste à détecter des défauts dans les rails du métro parisien à l'aide du courant de Foucault. Ces courants sont engendrés suite à la création d'un champ magnétique par un système de bobinage installé sur la pièce à contrôler et recueilli sur un autre système de bobinage sous forme de signal (Aissa Mamoune, 2009). Sur la base du signal recueilli (fréquence et épaisseur) il a été montré que cette approche pouvait non seulement détecter les défauts mais aussi les classer.

II.7.2. Prédiction de la température du liquidus du verre

La température du liquidus du verre d'oxydes est la température maximale à laquelle des cristaux sont en équilibre thermodynamique avec le liquide, cette température est d'une importance majeure dans le domaine de l'industrialisation du verre car la valeur de la viscosité à la température du liquidus est un élément important pour le choix des

paramètres des procédés de formage des verres d'où l'intérêt de la prédiction de cette température, surtout pour les verres ayant plus de trois composants. Kim et AL 1991, ont établi un modèle sur la base des réseaux de neurones pour la prédiction de cette température avec une fiabilité assez remarquable avec l'établissement des bases de données spécifiques pour chaque verre (Aissa Mamoune, 2009).

II.7.3. Pilotage automatique d'un véhicule autonome

Cette application a été testée sur un véhicule Mercedes 4X4 (baptisé REMI) équipé de plusieurs capteurs et modules par la société SAGEM. Le bon fonctionnement de ce véhicule a nécessité la conception de deux systèmes basés sur les réseaux de neurones par RIVALS et Al en 1994 et 1995. Les réseaux de neurones interviennent au niveau du pilotage pour déterminer les actions souhaitables en fonction des consignes de cap et de vitesse (Aissa Mamoune, 2009). Les domaines d'application des réseaux de neurones sont très étendus, voici quelques exemples KEL-1997 ; (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010) :

Tableau II. 2 Domaines & application du réseau de neurones (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010)

Agroalimentaire:	Analyse automatisée des odeurs dans le traitement de la nourriture (date de péremption). Contrôle de cuisson dans un four micro-ondes.
Assurance de qualité:	Classification des défauts de production. Vérification de pneumatiques. Contrôle de qualité de fabrication des microprocesseurs.
Détection des fraudes:	Dans l'usage des cartes de crédit. Dans l'usage des chèques. Vérification des signatures. Détection d'identité par l'analyse des habitudes des dépenses
Finance:	Prévision de bourse. Gestions des fonds de pension.
Gestion des documents et imprimés	Reconnaissance des caractères. Reconnaissance des visages. Reconnaissance des empreintes digitales. Reconnaissance des formes en général. Traitement automatisé des formulaires.
Marketing:	Serveur pour le placement des annonces «intelligents ». Optimisation des stratégies de marché. Prévision des demandes de transport par avion. Prévision de la consommation des boissons gazeuses. Sélection des usagers qui recevront des catalogues.

Médecine et santé:	Analyse des protéines pour le développement des drogues. Prédiction de la gravité de la maladie et l'usage des
	Ressources de l'hôpital.
Production	Contrôle de coulée continue. Contrôle des lamineurs. Contrôle et réduction de déchets dans la production des films photographiques.
Science et ingénierie:	Routage optimisé des circuits. Evaluation du timbre du voix et traitement d'audio. Spectroscopie et analyse des processus chimiques. Prévision de temps quantitative. Pilotage des véhicules autonomes.
Transport:	Détection des défauts dans le métro de London.

II.7.4. Types d'apprentissage

L'objectif de la phase d'apprentissage des RNA est de trouver, parmi toutes les fonctions paramétrées par les poids synaptiques, celle qui s'approche le plus possible de l'optimum. L'apprentissage consiste, donc à minimiser une fonction de coût à l'aide des algorithmes d'optimisation. L'un d'eux est décrit dans la section suivante (Derras 2011).

Il existe deux types d'apprentissage : l'apprentissage supervisé et l'apprentissage non supervisé. Le superviseur, ou professeur, fournit au réseau des couples d'entrée-sortie. Il fait apprendre au réseau l'ensemble de ces couples, par une méthode d'apprentissage, comme la rétro-propagation du gradient de l'erreur, en comparant pour chacun d'entre eux la sortie effective du réseau et la sortie désirée. L'apprentissage est terminé lorsque tous les couples entrée-sortie sont reconnus par le réseau. Ce type d'apprentissage se retrouve entre autres, dans le perceptron. Le deuxième type c'est l'apprentissage non supervisé. Celui-ci consiste à détecter automatiquement des régularités qui figurent dans les exemples présentés et à modifier les poids des connexions pour que les exemples ayant les mêmes caractéristiques de régularité provoquent la même sortie. Les réseaux auto-organiseurs de Kohonen (1981) sont les réseaux à apprentissage non supervisé les plus connus (Demartines, 1994).

La plupart des algorithmes d'apprentissage des réseaux de neurones formels sont des algorithmes d'optimisation (méthode supervisée). La méthode d'optimisation la plus célèbre et la plus utilisée en analyse neuronale est la rétro-propagation du gradient de l'erreur. On communément appeler le "deep learning" qui désigne une technique d'apprentissage

machine (machine learning). Cependant, ceux sont les réseaux à apprentissage supervisé qui sont les plus utilisés. Les domaines d'application de ces réseaux peuvent être classés essentiellement en deux catégories : la reconnaissance et la généralisation.

Dans les problèmes de reconnaissance, le réseau va apprendre à reproduire les sorties d'un ensemble de vecteurs d'apprentissage dont les entrées sont bruitées. Le réseau est censé générer les sorties adéquates bien que les entrées soient entachées d'erreur. Les applications de ces réseaux sont la reconnaissance de formes, de l'écriture, l'analyse des signaux, etc. Le réseau va reproduire une des sorties qu'il a déjà vues lors de l'apprentissage. Pour mémoriser toutes les entrées et sorties, le réseau va construire une hyper-surface dans l'espace des vecteurs d'apprentissage et passant par tous les points d'apprentissage. En général, il réclame un nombre important de neurones et par conséquent, de paramètres.

Pour les tâches d'approximation et d'interpolation, le réseau va apprendre à reproduire le plus précisément possible les sorties d'un ensemble de vecteurs d'apprentissage. Il doit généraliser l'information acquise à des vecteurs qui n'ont pas été présentés lors de l'apprentissage. Le fait de faire apprendre au réseau à reproduire ou à mémoriser exactement les informations données par les vecteurs d'apprentissage n'est pas désiré, parce que cela fait perdre sa performance de généralisation. Cette perte de généralisation est due au phénomène de sur-apprentissage. Les applications typiques de ces réseaux apparaissent surtout dans la robotique, (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).

Il s'ensuit qu'un réseau de neurones se distingue par trois caractéristiques principales :

- L'architecture du réseau qui caractérise un chemin particulier par lequel les éléments du réseau sont connectés et qui définit la direction de propagation des informations.
- La fonction d'activation des neurones qui dicte leur comportement.
- L'algorithme d'apprentissage du réseau (Eñaut Muxika Olasagasti, 2010).

II.7.5. Neurone Artificiel

II.7.5.1. Structure

Chaque neurone artificiel est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance des neurones amonts. A chacune de ces entrées est associé un poids w représentatif de la force de la connexion. Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones avals. A chaque connexion est associé un poids.

II.7.5.2. Comportement

On distingue deux phases : la première est habituellement le calcul de la somme pondérée des entrées (a) selon l'expression suivante : $a = \sum(w_i \cdot e_i)$

A partir de cette valeur, une fonction de transfert calcule la valeur de l'état du neurone. C'est cette valeur qui sera transmise aux neurones aval. Il existe de nombreuses formes possibles pour la fonction de transfert.

On remarquera qu'à la différence des neurones biologiques dont l'état est binaire, la plupart des fonctions de transfert sont continues, offrant une infinité de valeurs possibles comprises dans l'intervalle $(0, +1)$ (ou $(-1, +1)$).

Nous constatons que les équations décrivant le comportement des neurones artificiels n'introduisent pas la notion de temps. En effet, c'est le cas pour la plupart des modèles actuels de réseaux de neurones. Nous avons à faire à des modèles à temps discret, synchrone, dont le comportement des composants est indépendant du temps.

II.7.5.3. Entrées, x_i

Typiquement, les valeurs d'entrée sont des stimuli externes en provenance de l'environnement ou des sorties d'autres neurones artificiels. Elles peuvent être discrétisées grâce à un ensemble tel que $\{0,1\}$ ou bien être des valeurs réelles. Poids, w_i

La première chose que fait un neurone artificiel est de calculer la somme pondérée de ses entrées (i.e., le produit scalaire entre le motif d'entrée et les poids des connexions). Les poids sont des valeurs réelles qui déterminent la contribution de chaque entrée.

Le but d'un algorithme d'apprentissage pour un réseau de neurones est de déterminer le meilleur ensemble de poids pour le problème en considération. Trouver l'ensemble optimal est souvent un compromis entre temps de calcul, minimisation de l'erreur et conservation de la capacité de généralisation pour le réseau.

II.7.5.4. Seuil, u

Le seuil est un nombre réel qui est déduit de la somme pondérée des valeurs d'entrée. Parfois, le seuil est appelé valeur de biais (Aissa Mamoune, 2009). Il est bien connu que le biais du taux d'erreur estimé diminue en fonction du nombre de formations, de tests et lorsque les échantillons augmentent (Mehmet Gesoglu et al 2009). Dans ce cas, le nombre réel est additionné à la somme des valeurs d'entrée. Pour des raisons de simplicité,

le seuil peut être vu comme une entrée supplémentaire associée à un poids, où $w_0 = u$ et $x_0 = -1$.

II.7.5.5. Fonction d'activation

La fonction d'activation pour le neurone originel de Mc Culloch et Pitts (1943) était la fonction-pas unitaire. Cependant, le modèle a évolué et on retrouve maintenant un grand nombre de fonctions d'activation différentes comme la sigmoïde, linéaire seuillée et gaussienne. La fonction identité est la plus simple possible ; le résultat est appelé un assocateur linéaire.

Tableau II. 3 *exemples de fonctions d'activations*

Pas unitaire		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x < 0 \\ 1 & \text{if } x \geq 0 \end{cases}$
Sigmoïde		$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-\beta x}}$
Linéaire Seuillée		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq x_{min} \\ mx + b & \text{if } x_{min} < x < x_{max} \\ 1 & \text{if } x \geq x_{max} \end{cases}$
Gaussienne		$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$
Identité		$f(x) = x$

II.7.5.6. Sortie du neurone, y

Le neurone artificiel calcule sa sortie grâce à l'équation ci-dessous. C'est le résultat correspondant à l'application de la fonction d'activation à la somme pondérée des entrées, moins le seuil. Cette valeur peut être discrète ou réelle selon la fonction d'activation utilisée. Une fois que la sortie est calculée, elle peut être passée à un autre neurone (ou groupe de neurones) ou directement à l'environnement extérieur. L'interprétation de la sortie des neurones dépend du problème en considération. Par exemple, dans la classification de motifs, une sortie de 1 peut signifier que l'entrée appartient à une certaine classe, alors qu'une sortie de 0 signifie le contraire.

$$y = f(\sum_{i=1}^n w_i x_i - u) = f(\sum_{i=0}^n w_i x_i) \quad \text{Eq.II. 3}$$

II.7.5.7. Rétro-propagation

L'algorithme de rétro-propagation a été développé pour entraîner des perceptrons multicouches. Dans cette applet, nous étudierons comment il fonctionne pour un perceptron simple couche. Il fut popularisé par Rumelhart, Hinton et Williams (1986), bien que des idées similaires aient été développées antérieurement par d'autres (Werbos, 1974; Parker, 1985). L'idée est d'entraîner un réseau en propageant les erreurs de sortie en sens inverse du réseau à travers les couches. Ces erreurs servent alors à évaluer les dérivées de la fonction d'erreur en fonction des poids qui peuvent ainsi être ajustés.

L'algorithme de rétro-propagation pour un réseau de neurones simple couche utilisant la somme des erreurs quadratiques consiste en deux phases distinctes :

- Propagation : application d'une entrée ; évaluation des activations a_j et stockage de l'erreur δ_j dans chaque nœud j .

$$a_j = \text{Somme } i (W_{ij}(t) \cdot I_{pi})$$

$$A_{pj} = g(a_j)$$

$$\Delta_j = A_{pj} - I_{pj}$$

- Rétro-propagation : calcul de l'ajustement et mise à jour des poids Comme il n'y a qu'une couche (la couche de sortie), on calcule :

$$W_{ij}(t+1) = W_{ij}(t) - \eta \delta_j I_{pi}$$

(Ceci est appelé l'apprentissage "en ligne" car les poids sont ajustés chaque fois qu'une nouvelle entrée est présentée au réseau. Dans l'apprentissage "en batch", les poids sont ajustés après avoir fait la somme sur tous les motifs de l'ensemble d'apprentissage.)

II.7.5.8. Réseau de neurone monocouche : le perceptron

Le perceptron peut être considéré comme le premier des RNA. Il fut mis au point dans les années cinquante par Rosenblatt (1958). Comme son nom l'indique, le perceptron se voulait un modèle de l'activité perspective. Il se compose d'une rétine et d'une couche qui donne la réponse correspondant à la simulation donnée en entrée. Il existe 2 types de perceptrons : les perceptrons «feed-forward» et les perceptrons récurrents. Les perceptrons récurrents sont ceux qui alimentent leurs entrées avec leurs sorties, par opposition aux perceptrons feed-forward.

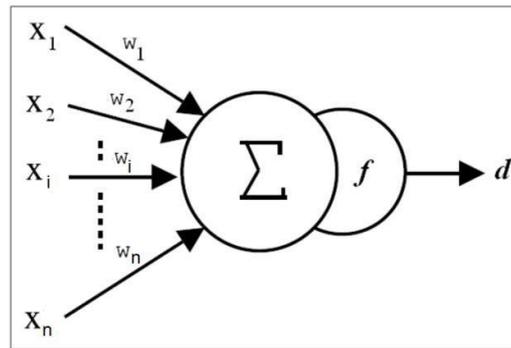


Figure II. 8 Perceptron non récurrent ou feed-forward à une sortie

L'idée générale de la technique de la rétro-propagation du gradient est de chercher le minimum de la fonction du coût (sortie désirée-sortie calculée) qui dépend des poids synaptiques W_i et ce par itération successive.

L'algorithme se déroule comme suit :

- Initialiser les poids W_i de manière aléatoire;
- Propager le signal de valeurs de l'entrée vers la couche de sortie ;
- Calculer le gradient de l'erreur notée $\nabla E = \partial E / \partial W$ (figure II.11);

La fonction E à minimiser est la somme de l'erreur quadratique moyenne de moindres carrés, définie par

$$E = \frac{1}{2} (d - y(\mathbf{h}))^2 \quad \text{Eq.II. 4}$$

$$\mathbf{h} = \sum_{i=1}^n W_i x_i \quad \text{Eq.II. 5}$$

Avec :
$$(\mathbf{h}) = f(\sum_{i=1}^n W_i x_i) \quad \text{Eq.II. 6}$$

y : sortie calculée par le RNA ;

h : somme pondérée des entrées du neurone de la couche de sortie ;

f : fonction d'activation ;

d : la sortie désirée ;

x_i : Variable d'entrée de la composante i .

On peut écrire E sous la forme :

$$E = \frac{1}{2} \delta^2 \text{ où } \delta = (d - y(\mathbf{h})) \quad \text{Eq.II. 7}$$

Corriger W_i en direction inverse du gradient (rétro-propagation):

$$\mathbf{W}_i \rightarrow \mathbf{W}_i - \Delta \mathbf{W}_i \quad \text{Eq.II. 8}$$

L'opérateur « \rightarrow » représente la mise à jour

Où
$$\Delta \mathbf{W}_i = \alpha \frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}_i} = \alpha \nabla E \quad \text{Eq.II. 9}$$

α : représente le taux ou le pas d'apprentissage, il a une faible magnitude et est compris entre (0 et 1).

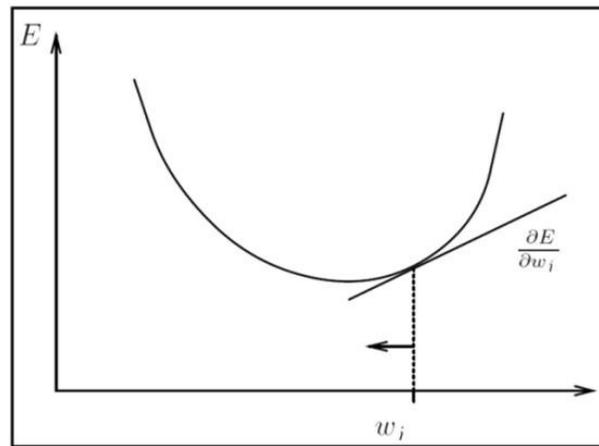


Figure II. 9 Gradient de l'erreur totale.

Continuer les étapes 2 et 3 tant que l'écart entre les W_i de deux époques successives est grand. Une époque représente un cycle propagation - rétro-propagation, appelée aussi itération. Calculons à présent : ΔW_i .

On suppose que la couche de sortie ne comporte qu'un neurone. L'erreur quadratique moyenne E vaut: $\frac{\partial E}{\partial W_i} = \frac{\delta}{\partial W_i} \cdot \frac{1}{2} \cdot \delta^2 = \delta \cdot \frac{\delta}{\partial W_i}$

$$\begin{aligned} &= \delta \cdot \frac{\delta}{\partial W_i} (d - y(h)) \\ &= \delta \cdot \left(- \frac{\partial y(h)}{\partial W_i} \right) \\ &= \delta \frac{\partial f(\sum_{i=1}^n W_i - X_j)}{\partial W_i} \end{aligned}$$

$f(\sum_{i=1}^n W_i - X_j)$ est une fonction composée. On note que $g(x) = \sum_{i=1}^n W_i \cdot X_j$

: elle peut être écrite sous la forme $(f \circ g)(x) = f(g(x))$, sa dérivée est donc $g'(x) \cdot f'(g(x))$

II.7.5.9. Perceptron multicouche {0;1}

Un perceptron multicouche est fait de plusieurs couches de neurones. Chaque couche est complètement connectée à la suivante. De plus, chaque neurone reçoit une entrée de biais additionnelle comme le montre le schéma ci-dessous :

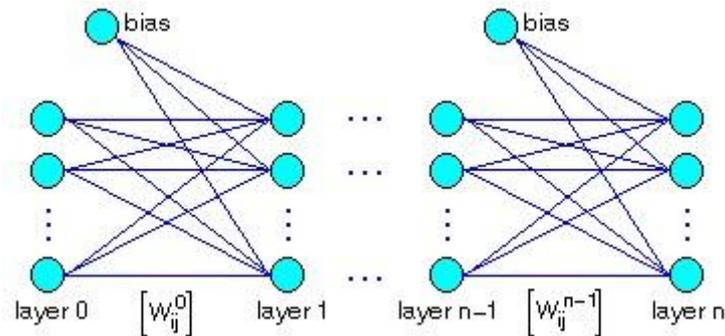


Figure II. 10 Schéma représentatif du perceptron multicouche (Mamoune 2011)

- W_{ijk} = poids du neurone i (dans la couche v) vers le neurone j (dans la couche $v+1$).
- I_p = vecteur d'entrée (motif p) = $(I_{1p}, I_{2p}, \dots, I_{bp})$.
- A_p = vecteur de sortie réelle (motif p) = $(A_{1p}, A_{2p}, \dots, A_{cp})$.

Dans cette **applet (un mini logiciel qui exécute dans la fenêtre d'une autre application)**, la sortie des neurones appartient à l'intervalle $\{0;1\}$.

II.7.6. Architecture des réseaux

Les réseaux de neurones artificiels sont des modèles mathématiques composés de nœuds fortement reliés entre eux. Ils élaborent un modèle complexe d'entrée avec un modèle complexe de sortie. Ces réseaux trouvent leur origine dans les réseaux biologiques dont ils ont la capacité étonnante d'apprendre sur la base de formation d'entrée-sortie, semblables au cerveau. La puissance du calcul neuronal vient de l'intercommunication massive des neurones et de la nature adaptative des poids qui relie l'ensemble des neurones. Ces derniers se sont avérés très utiles en apprenant des rapports complexes entre les données multidimensionnelles.

Il existe plusieurs types de réseaux, ces derniers diffèrent essentiellement dans l'architecture et les règles d'apprentissage et d'organisation. Les réseaux les plus généralement utilisés sont les perceptrons multicouches, qualifiés par des algorithmes de propagation inverse. Ces derniers sont simples, robustes et très puissants dans l'identification du modèle et la classification.

Dans ce travail, l'algorithme de Levenberg-Marquardt avec propagation inverse est utilisé. Cet algorithme est la variation de la méthode de Newton. Il convient bien à l'apprentissage quand l'indice de performance est identique à l'erreur moyenne.

L'architecture de base d'un tel réseau, représentée dans la figure II.13, est décomposée en une couche d'entrée (input), une couche cachée et une couche de sortie (output). Les liaisons entre les différents neurones dans les différentes couches se présentent de telle manière que l'output d'un neurone est un parmi les inputs de tous les neurones de la couche suivante et tous les inputs sont les outputs de la couche précédente. Le processus de transformation dans les divers neurones est déterminé à partir du signal d'entrer dans les couches cachées en associant un poids modifiable à chaque interconnexion. Chaque neurone dans la couche cachée transforme la somme des poids d'entrée en utilisant une fonction de transfert.

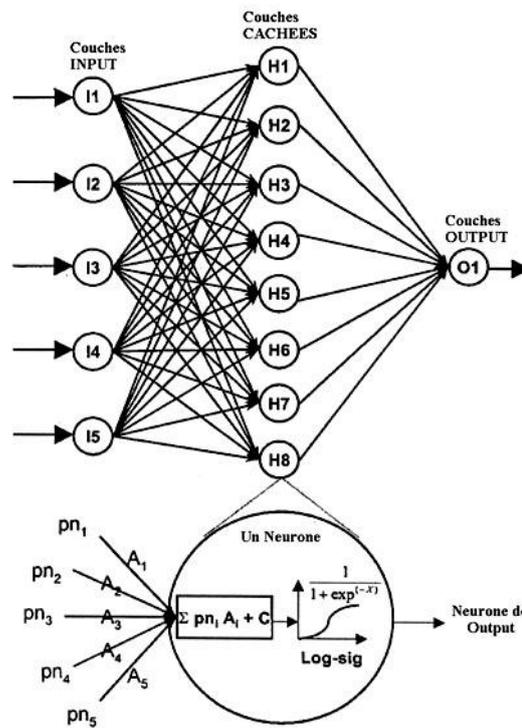


Figure II. 11 Architecture du réseau de neurone (Mamoune 2011)

Pour les réseaux développés dans ce travail, les fonctions de transfert utilisées pour les couches cachées sont de type Tan-Sigmoid, tandis que pour les outputs, la fonction Purelin a été adoptée. Il est à noter que les fonctions les plus utilisées sont de type linéaire, Tan-sigmoid ou Log-Sigmoid.

Monte Carlo Simulation

In this part we show that the quality of numerical model implementation appropriate to experimental phenomena has always been subject to doubts by the scientific community, verification can only be done by including the uncertain input parameters of Model the present work represents a qualitative study for the evaluation of the model adapted to the experimental results and This paper aims at performing a probabilistic analysis using Monte Carlo method by probabilistic approach has been applied to hydrogen desorption phenomenon in the wire rod for pre-stressed concrete.

The phenomenon was treated in a deterministic study by Carneiro in 2010, this work aims to reflect uncertainty property of the material of a high carbon steel such as effective diffusion coefficient (D_e) and concentration parameters (C_∞). A probabilistic simulation by Monte Carlo method was used to determine the contribution of each random variable on the variability of reduction in area in our case the limit state criteria required in the study is reduction in area parameter must be greater than or equal to 30% (Carneiro, 2010). Afterwards we study the influence of parameters that govern the hydrogen desorption and dispersion of the parameters while optimizing calculative time in order to determine the special variability of this latters and their influence of them on hydrogen release according to the parameter time to get an optimal storage time .

Références Bibliographique

- Aissa Mamoune S.M., 2009, Characterization and modeling of clays in Tlemcen region using neural networks , doctoral thesis, Abou Bakr Belkaid university.
- Arbib, M.A.,1998 .The handbook of Brain theory and neural networks. MIT Press, Cambridge, MA . 02142-1209 ISBN: 9780262511025 1134 pp. | 8.6 in x 10.9
- Au S.K., Beck J.L., (2001). "Estimation of small failure probabilities in high dimensions by
- Baecher, G.B. and Ingra, T.S. (1981). "Stochastic FEM in settlement predictions." Journal Journal Of the Geotechnical Engineering Division, ASCE, 107(4),449-463.
- Birinci F.,Tigdemir M., Demir F., 2001 ,Prediction of concrete compressive strength using artificial neural Networks . In: Proceedings of the symposium on modern methods, Istanbul, 161–169. DOI 10.1617/s11527-009-9468-0.

- Brenner, C.E. (1991). "Stochastic finite element methods: Literature review." Technical report, Inst. Of Engineering Mechanics, Univ. of Innsbruck, Austria, pp. 35-91.
- Debbah Y., Cherfia A., Saadi A., 2016, application of the neural network method for the prediction of vibrations induced by combined fault (in French) Sciences & Technologie B – N°43, 73-78.
- Demartines, P (1994). Analyse de données par réseaux de neurones auto-organisés, thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Derras B., 2011, Contribution of accelerometric data from KiK-Net to the prediction of seismic motion by the neuronal approach with the consideration of site effects (in French), doctoral thesis, Abou Bakr Belkaid university <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00653902>.
- Dreyfus, G., J-M. Martinez, M. Samuelides, M.B. Gordon, F. Badran, and S. Thiria (2008). Apprentissage statistique : Réseaux de neurones : Cartes topologiques Machines à vecteurs supports, eyrolles.
- Enaut Muxika Olasagasti (2010) ,Application des réseaux de neurones à l'identification d'un axe à machine outil . Thèse de doctorat
- Gesoglu M., Guneyisi E., (2007). Prediction of load-carrying capacity of adhesive anchors by soft computing techniques". Materials and structures, vol40 pp939–951. DOI 10.1617/s11527-007-9265-6.
- Gesoglu M., Guneyisi E., Ozturan T., Ozbay E., (2009). Modeling the mechanical properties of rubberized concretes by neural network and genetic programming. Materials and structures, pp 31-43 DOI: 10.1617/s11527-009-9468-0.
- Houmadi, Y. (2011). Prise en compte de la variabilité spatiale des paramètres géotechniques thèse de doctorat, Risk Assesment and Management Laboratory "RISAM" – Tlemcen University, Algeria.
- Huang, SP, Liang, B., Phoon, KK., 2009. Geotechnical probabilistic analysis by collocationbased
- Isukapalli, SS, Roy, A., Georgopoulos, PG., 1998. Stochastic response surface methods (SRSM) for uncertainty propagation: Application to environmental and biological Systems. Risk Analysis, 18(3), 357-363.
- Isukapalli, SS., 1999. Uncertainty analysis of transport-transformation models. PhD thesis, the state university of New Jersey

- Jayet A., 2002. Affective Computing: Apport des Processus Emotionnels aux Systèmes Artificiels. Site, www.grappa.univlille3.fr/~torre/Recherche/Encadrement/Jayet2003/#sdfootnote10anc.
- Kim S. S., Sanders T.H., 1991, Thermodynamic modeling of phase diagrams in binary alkali silicate systems, *Journal of the American Ceramics Society*, 74, 1833-1840 <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1991.tb07796.x>.
- Kohonen T., 1984, *Self Organization and associative memory*, (3rd Edition 1989) Springer, Berlin 1984
- Lemaire M., Muzeau J.-P., Mohamed A., and Mitteau J.-C., (1996). "Fiabilité et Sûreté
- Li, D., Chen, Y., Lu, W., Zhou, C., (2010). Stochastic response surface method for
- McCulloch W., Pitts W., 1943, A logical calculus of the ideas immanent, *Bulletin of Mathematical Biophysics*, Vol 5, 115-133. <https://doi.org/10.1007/BF02478259>.
- Mollon, G., Dias, D., and Soubra, A.-H., 2011. Probabilistic analysis of pressurized tunnels against face stability using collocation-based stochastic response surface method". *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, ASCE*, 137 (4), 385-397.
- Mukherjee A., Biswas S.N., 1997, constructed a model with two hidden layers feed-forward type of ANN for predicting the mechanical behavior of concrete at high temperature, *Nuclear Engineering and Design* (178)1-11 [https://doi.org/10.1016/S0029-5493\(97\)00152-0](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(97)00152-0).
- Poulton, M.M. (2001). Computational neural networks for geophysical data processing. *Handbook of geophysical exploration*, 30.
- Righetti, G., and Harrop-Williams, K. (1988). "Finite element analysis of random soil Risk Analysis, 18(3), 357-363.
- Shinozuka, M., and Deodatis, G. (1991). "Simulation of stochastic processes by spectral representation." *Appl. Mech. Rev*, 44(7), 191-203.
- Sorin, F., L. Broussard, P. Roblin (2001). Régulation d'un processus industriel par réseaux de neurones, *Techniques de l'Ingénieur, traité Informatique industrielle*.
- stochastic response surface method: An EXCEL add-in implementation. *Georisk subset simulation*", *Probabilistic Engineering Mechanics*, 16 (4): 263-277.
- Sudret B. and A. D. Kiureghian., (2000) "Stochastic Finite Element Methods and
- Sudret B. and A. D. Kiureghian., (2000) "Stochastic Finite Element Methods and Techniques, Université de Nantes, France.

Uysal M., Tanyildizi H., 2012 , Estimation of compressive strength of self-compacting concrete containing polypropylene fiber and mineral additives exposed to high temperature using artificial neural network . *Construction and Building Materials*, Vol.27, N°1, 404-414 <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2011.07.028>.

Vanmarcke, E.H. (1983). "Random fields: analysis and synthesis." MIT Press, Cambridge,

Yeh, C.H., and Rahman, M.S. (1998). "Stochastic finite element methods for the seismic response of soils." *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 22, 819-850

Youssef Abdel Massih, D., (2007). "Analyse du comportement des fondation superficielles filantes par des approches fiabilistes", Thèse de Doctorat, Faculté Des Sciences et des Techniques, Université de Nantes, France.

CHAPITRE III : SIMULATION DE LA DESORPTION DE L'HYDROGENE

III.1. Formulation mathématique de la diffusion de l'hydrogène

III.1.1. Introduction

La DIFFUSION est le processus par lequel la matière est transportée d'une part d'un système à l'autre en raison des mouvements moléculaires aléatoires. Elle traite la description des procédés de diffusion en termes de solutions de l'équation différentielle pour la diffusion [Cranck, 75]. Cependant la diffusion de l'hydrogène dans les alliages demeure un sujet d'actualité surtout si on fait la comparaison avec la diffusion des interstitiels lourds tels que le Carbone, l'Oxygène, l'Azote etc et ce bien que le coefficient de diffusion de ces derniers ($10^{-20} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$) soit très faible par rapport à celui de l'hydrogène ($10^{-12} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$) [Vo, 78]. En plus de sa grande diffusivité dans les solides, la faible masse de l'hydrogène et de ces isotopes fait que la contribution (effet tunnel) au mécanisme de diffusion est importante aux basses températures [Chikdene, 1989].

Le transfert de chaleur par conduction est également dû à des mouvements moléculaires aléatoires, et il y a une analogie évidente entre les deux processus. Cela a été reconnu par Fick (1855), qui a d'abord mis la diffusion sur une base quantitative en adoptant l'équation mathématique de la conduction thermique dérivée quelques années plus tôt par Fourier (1822). La théorie mathématique de la diffusion dans les substances isotropes est donc basée sur l'hypothèse que le taux de transfert de substance diffusante à travers la surface unitaire d'une section est proportionnel au gradient de concentration mesuré normalement à la section, comme le stipule l'équation III.1

III.1.2. Approche théorique de la diffusion

Les processus de diffusion de l'hydrogène dans une membrane peuvent être décrits selon les équations de Fick :

$$J_H = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Eq.III. 1}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \text{Eq.III. 2}$$

Avec : C la concentration en hydrogène, D le coefficient de diffusion, j le flux d'hydrogène, et x la profondeur ou la position [Oudriss, 2010].

Pour analyser l'hydrogène libéré par diffusion dans la barre de fer, basée sur une approche présentée par Crank (1970), la concentration en hydrogène dans un échantillon

cylindrique dont le rayon (r), la longueur (L), beaucoup plus grand que son diamètre, (d) peut être obtenue en résolvant l'équation III.3

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad \text{Eq.III. 3}$$

Pour résoudre les équations de Fick, il est nécessaire de connaître deux conditions aux limites et une condition initiale. Ces conditions dépendent des conditions expérimentales.

$$C_{\text{hyd}}(r, 0) = f(r) = C_0 \quad \text{pour } 0 \leq r \leq r_{\text{cyl}} \quad \text{Eq.III. 4}$$

Et $t = 0$

$$C_{\text{hyd}}(r_{\text{cyl}}, t) = C_{\infty} \quad \text{pour } r = r_{\text{cyl}} \text{ et } t > 0 \quad \text{Eq.III. 5}$$

La solution exacte de l'équation III.3 est donnée par l'expression suivante :

$$C_{\text{hyd}}(r, t) = C_{\infty} \left\{ 1 - \frac{2}{r_{\text{cyl}}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_n} \frac{J_0(r\alpha_n)}{J_1(r_{\text{cyl}}\alpha_n)} \exp(-D\alpha_n^2 t) \right\} +$$

$$\frac{2}{r_{\text{cyl}}^2} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-D\alpha_n^2 t) \frac{J_0(r\alpha_n)}{J_1^2(r_{\text{cyl}}\alpha_n)} \int r f(r) J_0(r\alpha_n) dr \quad \text{Eq.III. 6}$$

$$\frac{c(r, t) - c_0}{c_{\infty} - c_0} = 1 - \frac{2}{R'} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D\alpha_n^2 t} J_0(\alpha_n r)}{\alpha_n J_1(\alpha_n R')} \quad \text{Eq.III. 7}$$

Où α_n représente les racines positives de la fonction de Bessel:

$$J_0(r\alpha_n) = 0$$

Au numérateur du membre gauche de l'équation, on ajoute et retranche C_{∞} , ie :

$$\frac{C(r, t) - C_0}{C_{\infty} - C_0} = \frac{(C(r, t) - C_{\infty}) + (C_{\infty} - C_0)}{C_{\infty} - C_0} = \frac{(C(r, t) - C_{\infty})}{C_{\infty} - C_0} + 1 \quad \text{Eq.III. 8}$$

On transposons la formule suivante :

$$1 - \frac{(C(r, t) - C_{\infty})}{C_0 - C_{\infty}} \quad \text{Eq.III. 9}$$

On remplaçant la formule (9) expression dans l'équation (8), on trouve :

$$1 - \frac{(C(r, t) - C_{\infty})}{C_0 - C_{\infty}} = 1 - \frac{2}{R'} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D\alpha_n^2 t} J_0(\alpha_n r)}{\alpha_n J_1(\alpha_n R')} \quad \text{Eq.III. 10}$$

En simplifiant 1 et en changeant le signe des deux côtés, on trouve :

$$\frac{(C(r,t) - C_\infty)}{C_0 - C_\infty} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D\alpha_n^2 t} J_0(\alpha_n r)}{\alpha_n J_1(\alpha_n R')} \quad \text{Eq.III. 11}$$

Maintenant Posons :

$$F(r,t) = \frac{C(r,t) - C_\infty}{C_0 - C_\infty} \quad \text{Eq.III. 12}$$

Et soit :

$$F(t) = \frac{C(t) - C_\infty}{C_0 - C_\infty} \quad \text{Eq.III. 13}$$

La moyenne de F(r; t) sur le cylindre (la moyenne bien sur porte sur r et non sur t).

Alors sa moyenne se calcule par :

$$F(t) = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{R'} F(r,t) r dr d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{R'} r dr d\theta} \quad \text{Eq.III. 1410}$$

D'un côté on a

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{R'} r dr d\theta = \pi(R')^2 \quad \text{Eq.III. 1511}$$

De l'autre côté, en tenant compte de la formule de calcul des primitive des fonctions de Bessel, on a :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{R'} r J_0(\alpha_n r) dr = 2\pi \frac{R' \cdot J_1(\alpha_n R')}{\alpha_n} \quad \text{Eq.III. 16}$$

En calculant la moyenne par intégrale les deux membres de l'équation III.13 par rapport à r avec $0 \leq r \leq R'$ et $0 \leq \theta \leq 2\pi$

$$\begin{aligned} \frac{C(t) - C_\infty}{C_0 - C_\infty} &= 2 \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{R'} \frac{e^{-D\alpha_n^2 t} J_0(\alpha_n r)}{\alpha_n R' \cdot J_1(\alpha_n R')} r dr d\theta}{\pi(R')^2} \\ \frac{c(t) - c_\infty}{c_0 - c_\infty} &= 2 \frac{e^{-D\alpha_n^2 t}}{\alpha_n \pi (R')^3 \cdot J_1(\alpha_n R')} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{R'} J_0(\alpha_n r) \cdot r dr d\theta \\ &= 2 \frac{e^{-D\alpha_n^2 t}}{\alpha_n \pi (R')^3 \cdot J_1(\alpha_n R')} \sum_{n=1}^{\infty} \left(2\pi \frac{R' \cdot J_1(\alpha_n R')}{\alpha_n} \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{4}{(R')^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D\alpha_n^2 t}}{\alpha_n^2} \quad \text{Eq.III. 17}$$

Les coefficients α_n sont les racines positives de la fonction de Bessel du premier type et d'ordre zéro; ces racines peuvent être approximées par la relation ci-dessous:

En remplaçant $\alpha_n = \frac{(4n-1)\pi}{4R'}$ ou bien $\alpha_n = \frac{(4n-1)\pi}{2d}$ on trouve :

$$\frac{C(t) - C_{\infty}}{C_0 - C_{\infty}} = \frac{64}{\pi^2 (R')^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\left(\frac{(4n-1)\pi}{2d}\right)^2 D t}}{(4n-1)^2} \quad \text{Eq.III. 18}$$

Employant seulement le premier terme de cette série et vu un coefficient de diffusion effectif,

De, pour la diffusion En présence de piège, l'équation suivante est atteinte :

$$\frac{C(t) - C_{\infty}}{C_0 - C_{\infty}} = \frac{64}{9\pi^2} \exp\left[-\left(\frac{3\pi}{2d}\right)^2 D e t\right] \quad \text{Eq.III. 19}$$

Dans le cas où les pièges sont considérés réversibles, le coefficient de diffusion effectif de l'hydrogène a été déterminé par l'analyse de Shewmon :

$$D e = \frac{D_L C_L}{C_L + C_t(1 - \theta_t)} \quad \text{Eq.III. 20}$$

D_L le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans la matrice (L= Lattice)

C_L la concentration de l'hydrogène dans la matrice

C_t la concentration de l'hydrogène dans le piège à l'instant t

θ_t le taux d'occupation des sites interstitiels où $\theta_t = C_t / N_L$ avec N_L de l'ordre de $5,1.10^{29} \text{ m}^{-3}$

En prenant le logarithme népérien de l'équation précédente III.20, nous obtenons:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{Q}{R} \left(\frac{1}{T}\right) \quad \text{Eq.III. 21}$$

En terme de logarithme décimale

$$\log D = \log D_0 - \frac{Q}{2.3R} \left(\frac{1}{T}\right) \quad \text{Eq.III. 22}$$

Malgré que les termes soient constants, l'équation est similaire à l'équation d'une droite

$$Y=b+mx$$

Eq.III. 23

Là où Y et X correspondent respectivement aux variables D et $\log 1 / T$ ayant la pente et l'ordonnée à l'origine de $Q / 2.3R$ et $\log D_0$, respectivement. C'est, en fait, la manière dont les valeurs Q et D_0 sont présentés. De l'équation (III.22) la pente du segment de droite sur la figure 2 si la pente est égale à $Q / 2,3R$, et l'ordonnée à l'origine à $1 / T$ donne la valeur de $\log D_0$ [E. A. Brandes et G. B. Brook, Smithells Metals, seventh Edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1992]. Ainsi, l'énergie d'activation peut être déterminée comme l'équation suivante et par conséquent, elle nous donne l'origine de l'éq III.21

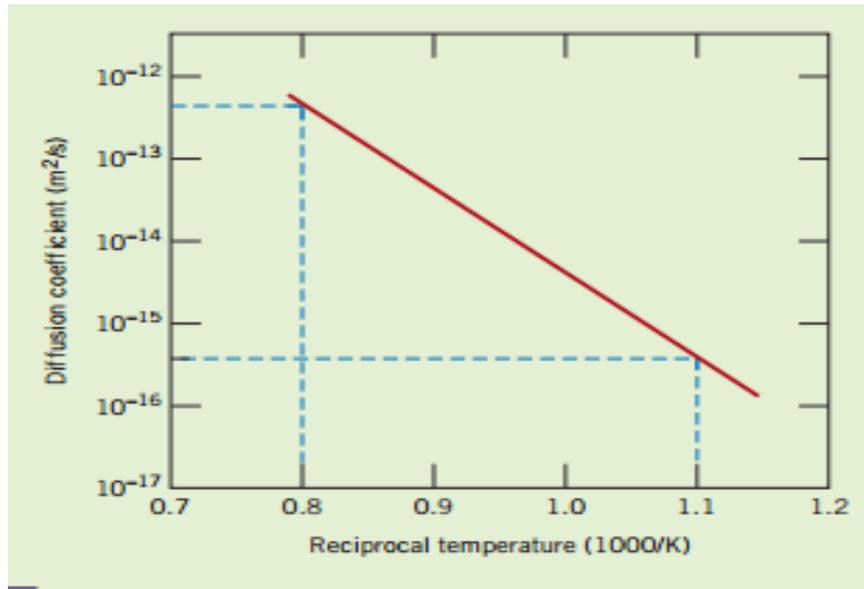


Figure III. 1 Tracé du coefficient de diffusion en fonction de la température réciproque [Brandes et Al, 1992]

$$Q_d = -2.3R(\text{slope}) = -2.3R \left[\frac{\Delta(\log D)}{\Delta\left(\frac{1}{T}\right)} \right] = -2.3R \left[\frac{\log D_2 - \log D_1}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}} \right] \quad \text{Eq.III. 24}$$

Considérant que $\theta_t \approx 1$

$$De = D_L \text{ et } R \frac{\partial \ln D}{\partial (1/T)} = Q = H_a = H_m \quad \text{Eq.III. 25}$$

Dans le cas $\theta_t \leq 1$

$$De = D_L \frac{C_L}{C_t} \text{ et } R \frac{\partial \ln D}{\partial (1/T)} = Q = H_a = H_m + H_b \quad \text{Eq.III. 26}$$

Considérant que $\theta_t \ll 1$

Où : R est la constante des gaz parfaits,

T est la température absolue,

H_a est l'énergie d'activation de l'hydrogène dans le piège réversible

H_m est l'énergie d'activation de l'hydrogène dans une matrice métallique parfaite

H_b est l'énergie de liaison entre l'hydrogène et le piège

Des alors l'équation devient :

$$C_t = C_\infty + 0.72(C_0 - C_\infty) \exp\left(-\frac{22.2 D_e t}{d^2}\right) \quad \text{Eq.III. 27}$$

D_e a été estimé par Carneiro égale à $2.3 \times 10^{-5} \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$

Le coefficient de diffusion d'un corps dissous interstitiel dans une matrice métallique est indiqué par Shewmoon par :

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad \text{Eq.III. 28}$$

Le coefficient de diffusion effectif de l'hydrogène (D_e) est exprimé par l'équation (29). En comparant les équations (III.25) et (III.26), D_e peut être exprimé par

$$D_e = D_{0e} \exp\left(-\frac{H_a}{RT}\right) \quad \text{Eq.III. 29}$$

Pour la diffusion de l'hydrogène dans le Fe, Porter et Easterling ont rapporté que la valeur du D_0 qui est égale à $0.1 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$. En utilisant cette valeur pour le D_0 , la valeur estimée de $H_a = 21 \text{ kJ mol}^{-1}$. Considérant H_m égale à 8 kJ mol^{-1} , H_b est estimé à 13 kJ mol^{-1} . Cette estimation approximée suggère que les pièges sont des interfaces Fe/Fe₃C, et que la valeur de H_b a été estimée par Hong et Lee à $10.85 \text{ kJ mol}^{-1}$ (Hong, 1983)

Une équation reliant la striction, Z , au temps de stockage peut être obtenue en supposant une relation linéaire entre « Z » et la teneur en hydrogène:

$$Z = Z_0 + E(C_0 - C_t) \quad \text{Eq.III. 30}$$

Dans cette équation le Z_0 est la striction initiale mesurée juste après élaboration E est une constante, en remplaçant l'équation III.30 dans l'équation III.27 on obtient :

$$Z = Z_0 + E(C_0 - C_\infty) \left[1 - 0.72 \exp\left(-\frac{22.2 D_e t}{d^2}\right)\right] \quad \text{Eq.III. 31}$$

Pour la détermination de la constante E , on a présumé l'existence d'une relation linéaire entre la concentration et la striction, grâce à la courbe de tendance illustrée sur la figure III.2 jugée fiable ayant un coefficient de corrélation de l'ordre de 91%, on a pu obtenir et la valeur exacte de la constante E

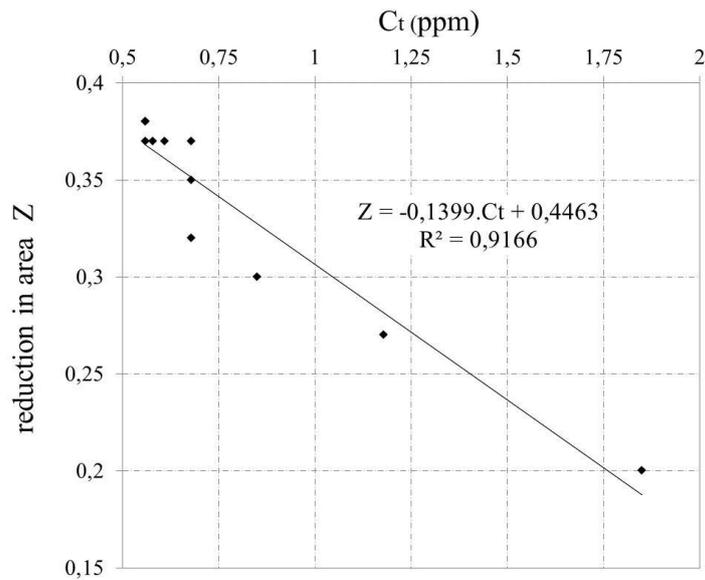


Figure III. 2 *Courbe de tendance reliant la striction à la concentration*

III.1.3. Conclusion :

Il est bien connu, et depuis longtemps, que les phénomènes de la physique et de la mécanique sont écrits par des formules mathématiques.

La raison pour laquelle les mathématiques sont indispensables pour l'étude de problèmes liés au développement des nouvelles technologies et à l'innovation est que désormais le design de nouveaux produits industriels ou l'illustration de certains phénomènes pouvant influencer la matière comme le présent contexte est le plus souvent réalisé à l'aide de la modélisation mathématique et de la simulation numérique et non plus avec la réalisation de prototypes bien plus coûteux, ou tout simplement irréalisables. La simulation se fait à l'aide d'ordinateurs qui calculent des solutions approchées des problèmes à résoudre (décrits par des équations mathématiques)

La simulation peut être faite sans trop de rigueur, avec des méthodes de calcul numérique existantes, ou avec l'utilisation de boîtes noires toute prêtes ; et cela peut donner de bons résultats ;

L'intérêt de ce chapitre est de connaître les différentes étapes par ordre chronologique allons de l'équation de Fick basique sur la diffusion jusqu'à l'équation qui régit le phénomène de désorption de l'hydrogène par ces conditions réelles.

III.2. Analyse probabiliste de la désorption de l'hydrogène par la méthode de Monte Carlo

III.2.1. Introduction

Dans une telle approche, toutes les incertitudes associées au modèle, aux paramètres, aux facteurs humains, etc.... en déduisent des résultats eux-mêmes affectés par des incertitudes. Ainsi, quelle que soit la nature du problème étudié, les résultats sont exprimés sous une forme homogène, à savoir la probabilité d'occurrence de certains événements. L'objectif principal est que l'acier en question subit une opération de tréfilage après son élaboration et que cette opération consiste à faire une traction. C'est lors de cette opération que le matériau est le plus vulnérable à la pénétration de l'hydrogène et l'étape suivante consiste à faire un dégazage afin d'évacuer l'hydrogène de cet acier.

Dans le cadre de notre étude on cherche à substituer la regazéification par une libération naturelle d'hydrogène en temps de stockage optimal afin de permettre l'échappement de l'hydrogène. C'est pour ne pas compromettre l'utilisation de cet acier qu'intervient la méthode probabiliste en incluant des incertitudes qui interviennent dans l'échappement de l'hydrogène. Cette méthode nous permet d'indiquer un temps de stockage minimal et un coût à estimer. Le présent travail vise à rendre compte des variations de l'hydrogène contenu et la striction du fil machine, avec un temps de stockage optimal et minimal à température ambiante.

Pour permettre le dégazage naturel de l'hydrogène, de tiges de fil à haute teneur en carbone sont utilisées dans la fabrication de tiges d'acier K. Pour des applications de béton précontraint, des paramètres des matériaux, tel le coefficient de diffusion effectif (D_e) et la concentration (C_∞), sont modélisés par des champs aléatoires pour tenir compte de la variabilité spatiale du matériau dans le but d'obtenir le paramètre de striction désiré Z (Tableau III.2). Ainsi, la méthode Monte-Carlo Simulation (MCS) est utilisée pour calculer la fonction de distribution de probabilité (PDF) de la réponse du système ou la probabilité de défaillance (pf).

La probabilité de rupture d'un système est généralement calculée à l'aide de la méthode des simulations de Monte-Carlo (Fenton et al. 2005 ; Griffiths et al. 2006 et Al). Cette méthode est très gourmande en temps de calcul, surtout lorsqu'il s'agit de problèmes ayant des probabilités de rupture très faibles de l'ordre de 10^{-7} . D'après les courbes de

Maurice Lemaire. Cette méthode a pour objectif d'effectuer une analyse probabiliste de la diffusion (De) de l'hydrogène et qui est spatialement variable. Dans cette étude, le champ aléatoire (De) a été discrétisé en un nombre fini de variables aléatoires à l'aide de l'expansion de Karhunen-Loeve (KL).

En premier lieu une étude portant sur les distances d'autocorrélation du champ aléatoire par rapport à la probabilité de défaillance ensuite par rapport aux distances d'autocorrélation horizontale et verticale .En second lieu, l'étude de la variabilité spatiale et temporelle des distances d'autocorrélation et par la suite l'étude paramétrique des variables aléatoires et l'optimisation du temps de calcul-Impact des coefficients de variation (COV) des différentes variables aléatoires sur la fonction de densité de probabilité des réponses du système.

Méthode de simulation directe (Monte Carlo)

Elle consiste à effectuer un grand nombre N_s de simulations (tirages) des variables aléatoires du problème étudié. Pour chaque simulation, la fonction d'état est calculée et l'on dénombre les simulations conduisant à la défaillance de la structure N_{sf} . La probabilité de rupture P_f est alors estimée par le rapport entre le nombre de simulations conduisant à la rupture N_{sf} et le nombre total de tirages N_s , soit :

$$\overline{P_f} = \frac{N_{sf}}{N_s} \approx P_f \quad \text{Eq.III. 32}$$

Où N est le nombre total de simulations. Cet estimateur de la probabilité de rupture peut être écrit aussi comme suit :

$$P_f = \frac{1 \sum_{i=1}^{N_s} I[G(x)]}{N_s} \quad \text{Eq.III. 33}$$

Où $I[G(x)]$ est le domaine d'insécurité (failure), il est égal à 1 dans le domaine de l'insécurité et est égal à 0 dans le domaine de sécurité.

$$I[G(x)] = \begin{cases} 1 & \text{si } G(x) \leq 0 \\ 0 & \text{si } G(x) > 0 \end{cases}$$

La méthode MCS a les caractéristiques suivantes :

- Généralités : Le direct MCS est complètement général, et s'applique à toute distribution des variables aléatoires de base, y compris les variables aléatoires discrètes.
- Précision : Pour l'échantillon de taille $N \rightarrow \infty$, la probabilité estimée converge vers le résultat exact.
- Efficacité : En règle générale, le temps CPU augmente linéairement avec environ $1/P_f$. En règle générale, la taille de l'échantillon nécessaire pour obtenir une estimation de la probabilité d'une bonne confiance est d'environ $100/P_f$.

Plusieurs méthodes proposent d'améliorer la méthode de Monte Carlo, comme la "Méthode de simulation directionnelle". Elle utilise les propriétés de symétrie rotationnelle de l'espace des variables gaussiennes centrées réduites (standardisées). Dans cet espace, les variables sont représentées par des lois de Gauss centrées en 0 et d'écart-type :

1. La transformation de Rosenblath est utilisée pour effectuer un changement du repère transformant l'espace des variables physiques (lois de distributions quelconques) en un espace de variables gaussiennes centrées réduites. Cet espace est ensuite divisé en un certain nombre de directions caractérisées par un vecteur unitaire en partant de l'origine du repère. La probabilité de défaillance du système est évaluée par un traitement statistique des valeurs des probabilités de défaillance calculées sur les différentes directions. Comme la méthode de Monte Carlo, cette méthode n'impose aucune propriété particulière de la fonction d'état limite et permet d'évaluer sans biais la probabilité de défaillance du composant. Elle offre l'avantage d'être plus performante que cette dernière en termes de coûts de calculs.

(Houmadi, 2011).

III.2.2. Analyse déterministe

L'acier de qualité commerciale utilisé dans cette étude a été produit sous forme de fil machine laminé à chaud et à refroidissement contrôlé de 11 mm de diamètre. Sa composition chimique (en pourcentage en poids) est mentionnée dans le tableau III.1

Tableau III. 1 Composition chimique de l'acier (Carneiro 2011)

Eléments	C	Mn	P	S	Si	Al	N
Taux %	0.82	0.77	0.015	0.004	0.12	0.0021	0.0040

III.2.3. Modèle mathématique

La première loi de Fick décrit le gradient de concentration dans le temps comme suit:

$$J = -D \nabla \varphi \quad \text{Eq.III. 34}$$

Où J est le flux diffusif d'atomes d'hydrogène en mol / m² s, D est le coefficient de diffusion en m² / s, ∇ est l'opérateur de gradient, pour de nombreux problèmes de matière, ce n'est pas le flux qui importe autant que la concentration à un moment donné temps (Cranck 1975).

La deuxième loi de Fick donne une relation qui décrit la variation du gradient de concentration en fonction du temps et est exprimée par l'équation suivante:

$$\frac{\partial C_{hyd}}{\partial t} = -D \nabla^2 C_{hyd} \quad \text{Eq.III. 35}$$

Où C_{hyd} est le gradient de concentration en mol / m³. En le réduisant sous forme de coordonnées cylindriques, on obtient:

$$\frac{\partial C_{hyd}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{hyd}}{\partial r^2} \quad \text{Eq.III. 36}$$

En considérant les conditions initiales et aux limites suivantes:

$$C(r,0) = C_0 \text{ pour } 0 \leq r \leq R \text{ et } t = 0 \quad \text{Eq.III. 37}$$

$$\frac{\partial C}{\partial r} = 0 \text{ pour } r = 0 \text{ et } t > 0 \quad \text{Eq.III. 38}$$

$$C(R,t) = C_\infty \text{ pour } r = R \text{ et } t > 0 \quad \text{Eq.III. 39}$$

Où r est le rayon et R est le rayon de l'échantillon

La solution exacte de l'équation III. 37 , en considérant les conditions calculées par les équations III. 38 et III.39, est la suivante (Cranck 1975).

$$\frac{C(r,t) - C_0}{C_\infty - C_0} = 1 - \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-D \alpha_n^2 t) J_0(\alpha_n^2 r)}{\alpha_n^2 J_1(\alpha_n^2 R)} \quad \text{Eq.III. 40}$$

$$\alpha_n = \frac{(4n-1)\pi}{4R} = \frac{(4n-1)\pi}{2d} \quad \text{Eq.III. 41}$$

α_n sont des racines positives de la fonction de Bessel et que d est le diamètre.

En utilisant uniquement le premier terme de cette série et en considérant un coefficient de diffusion effectif «De» pour la diffusion contrôlée par le piège et la concentration moyenne en C_t de l'hydrogène au temps «t» et « C_0 » la concentration au temps $t = 0$ conduisant à l'équation suivante:

$$\frac{C_t - C_\infty}{C_0 - C_\infty} = \frac{64}{9\pi^2} \exp\left[-\left(\frac{3\pi}{2d}\right)D_e t\right] \quad \text{Eq.III. 42}$$

$$C_t = C_\infty + 0.72(C_0 - C_\infty) \exp\left(\frac{-22.2D_e t}{d^2}\right) \quad \text{Eq.III. 43}$$

En supposant une relation linéaire entre "Z" la striction et la concentration

$$Z = Z_0 + E(C_0 - C_t) \quad \text{Eq.III. 44}$$

En remplaçant l'eq. III.15 dans l'eq. III .14 on obtient:

$$Z = Z_0 + E(C_0 - C_\infty) \left[\left(1 - 0.72 \exp\left(\frac{-22.2D_e t}{d^2}\right) \right) \right] \quad \text{Eq.III. 45}$$

III.2.4. Analyse probabiliste

Dans ce travail, une analyse probabiliste est réalisée sur la réduction de surface d'une barre d'acier hétérogène utilisée dans un béton précontraint dont les propriétés sont spatialement variables en déterminant les valeurs moyennes du coefficient de concentration et de diffusion et du coefficient de variation (COV). Dans cette étude, les champs aléatoires de ces propriétés ont été discrétisés en un nombre fini de variables aléatoires à l'aide de l'expansion de Karhunen-Loeve (KL). Les valeurs illustratives utilisées pour les moments statistiques des différentes variables aléatoires sont celles couramment rencontrées dans la pratique (Carneiro 2011). Celles-ci sont données dans les tableaux III.2 et III.3.

Tableau III. 2 Valeurs initiales de la teneur en hydrogène « C_0 » de la résistance à la traction et de la striction « Z » de l'acier étudié

Paramètres	Co (ppm)	Z (%)
Valeur mesurée	1.85	20±2
Valeur spécifiée (fonction d'état limite G)	/	≥30

Tableau III. 3 Données d'entrées du modèle

Paramètres	Moyenne	Coefficient de variation (COV)
C_0 (ppm)	0.56	0.06
De (mm ² /s)	0.08	0.13

III.2.4.1. Expansion karhnuen-loeve (K-L)

Dans la littérature, on peut trouver plusieurs méthodes de discrétisation proposées par les chercheurs, qui consistent à décomposer les champs initiaux en fonctions déterministes complètes optimales (Vanmarqke,1983) (Soubra et al,2012),. Pour ce faire, la discrétisation d'une section implique une subdivision structure d'échantillon en petites sections de champ aléatoire dans la direction de l'axe des x et de l'axe des y, comme indiqué à la figure : III.3 Toutefois, la discrétisation avec plus d'éléments fournit des résultats plus précis mais nécessite également plus de temps de calcul.

Le passage de la représentation du champ aléatoire continu à un nombre limité de variables aléatoires est nécessaire pour introduire l'incertitude des propriétés des matériaux dans un modèle de calcul. Pour ce faire, il faut choisir une méthode de discrétisation. Dans cette étude, la méthode d'expansion de Karhunen-Loève (K-L) a été adoptée pour la discrétisation de l'échantillon.

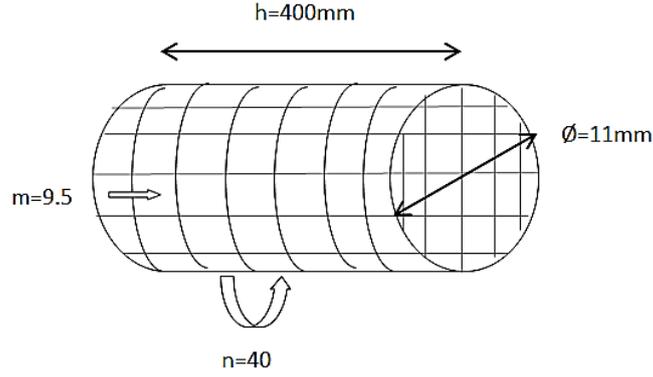


Figure III. 3 Modèle de discrétisation dimensionnelle

Où n est le nombre d'éléments le long de l'axe des abscisses qui est égal à 10 éléments avec un pas n égal à 40 mm et m est le nombre d'éléments suivant l'axe des y , égal à 10 éléments avec un pas m égal à 9,5 mm. Le champ aléatoire a été discrétisé en utilisant l'expansion de Karhunen-Loève (KL). Selon cette méthode, il fournit une bonne approximation du champ aléatoire $H(X, \theta)$ (Spanos, 1983) (Spanos, 1991) (Sudret, 2008) (Ourrad et al, 2016).

$$H(X, \theta) = \mu + \sum_{i=1}^{\infty} H_i(X) \xi_i(\theta) \quad \text{Eq.III. 46}$$

Pour introduire l'incertitude des propriétés des matériaux dans un modèle de calcul, il est nécessaire de passer de la représentation du champ aléatoire continu $H(X)$ à un nombre limité de variables aléatoires. Pour ce faire, il faut choisir une méthode de discrétisation. Ces approches sont diverses et peuvent être divisées en trois catégories: la méthode par point, la méthode de la discrétisation moyenne et la méthode de développement en série. Dans ce travail, nous avons utilisé l'expansion Karhunen-Loève (KL) qui appartient à la méthode d'expansion en série. L'expansion KL fournit une caractérisation du deuxième moment d'un processus aléatoire en termes de fonctions orthogonales déterministes et de variables aléatoires non corrélées.

Le champ aléatoire approximatif est défini en tronquant la série ordonnée en prenant la valeur M au lieu de ∞ :

$$H(X, \theta) \rightarrow H(H, \theta) = \mu + \sum_{i=1}^M H_i(X) \xi_i(\theta) \quad \text{Eq.III. 47}$$

$$H_i(X) = \sqrt{\lambda_i} \varphi_i(x) \quad \text{Eq.III. 48}$$

$\xi_i(\theta)$: Variable aléatoire non corrélée

θ : indique le caractère aléatoire du montant correspondant

X: coordonnées spatiales dans l'espace physique

Vecteurs propres et valeurs propres de la fonction d'autocorrélation.

Dans notre cas, nous avons pris M égal à 200; le choix du nombre M de termes dépend de la précision souhaitée du problème traité : K.

Dans cette étude, les différentes valeurs de distance d'autocorrélation horizontale et verticale ont été étudiées et analysées. La fonction d'état limite utilisée pour calculer la probabilité de défaillance est définie comme suit:

$$G = Z_{\text{lim}} - Z \quad \text{Eq.III. 49}$$

Où : $Z_{\text{lim}} = 30\%$

Il convient de souligner ici que cette étude utilise la méthodologie de simulation de Monte Carlo (MCS) pour calculer la fonction de distribution de probabilité (PDF) de la réponse du système ou la probabilité de défaillance.

III.2.5. Résultats et discussion

III.2.5.1. Influence des distances d'autocorrélation

Une étude paramétrique a été réalisée pour déterminer l'effet des distances d'autocorrélation L_x et L_y sur la probabilité de défaillance. La figure : III.4, montre l'effet de la distance d'autocorrélation sur la probabilité de défaillance pour le cas du champ aléatoire isotrope ($L_x = L_y$). Cette figure montre également la probabilité de défaillance correspondant à un matériau homogène. La probabilité de défaillance a été calculée en supposant que le matériau soit homogène et présente les mêmes valeurs moyennes des variables aléatoires le long de l'échantillon.

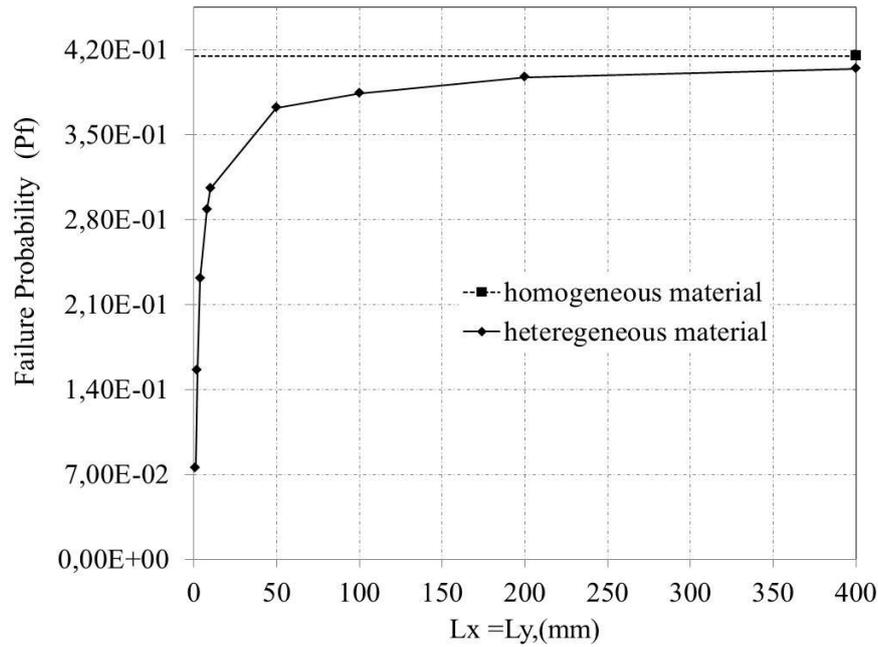


Figure III. 4 Effet des distances d'autocorrélation (L_x et L_y) sur la probabilité de défaillance dans le cas d'un champ aléatoire isotrope

Dans ce cas, la probabilité de défaillance a été calculée et a les mêmes valeurs moyennes que les variables aléatoires. Afin d'étudier l'effet de l'anisotropie du champ aléatoire, la probabilité de défaillance présentée en fonction de la distance d'autocorrélation verticale et horizontale sur les figures III.5 et III.6 respectivement.

L'augmentation de la probabilité de défaillance due à l'augmentation de la distance d'autocorrélation peut être expliquée comme suit:

Lorsque la distance d'autocorrélation est très grande, le matériau tend à être homogène. Dans ce cas, la réduction de surface a été jugée trop proche de celle obtenue lors de l'étude de matériau homogène. Pour des distances d'autocorrélation plus petites une hétérogénéité de matériau est obtenue ce qui entraîne une variabilité des variables aléatoires ayant une influence significative sur la réduction de surface. Dans ce cas, la réduction de surface est importante pour certaines sections importantes des variables aléatoires. Elle est faible pour les autres sections contenant une faible valeur de ces variables.

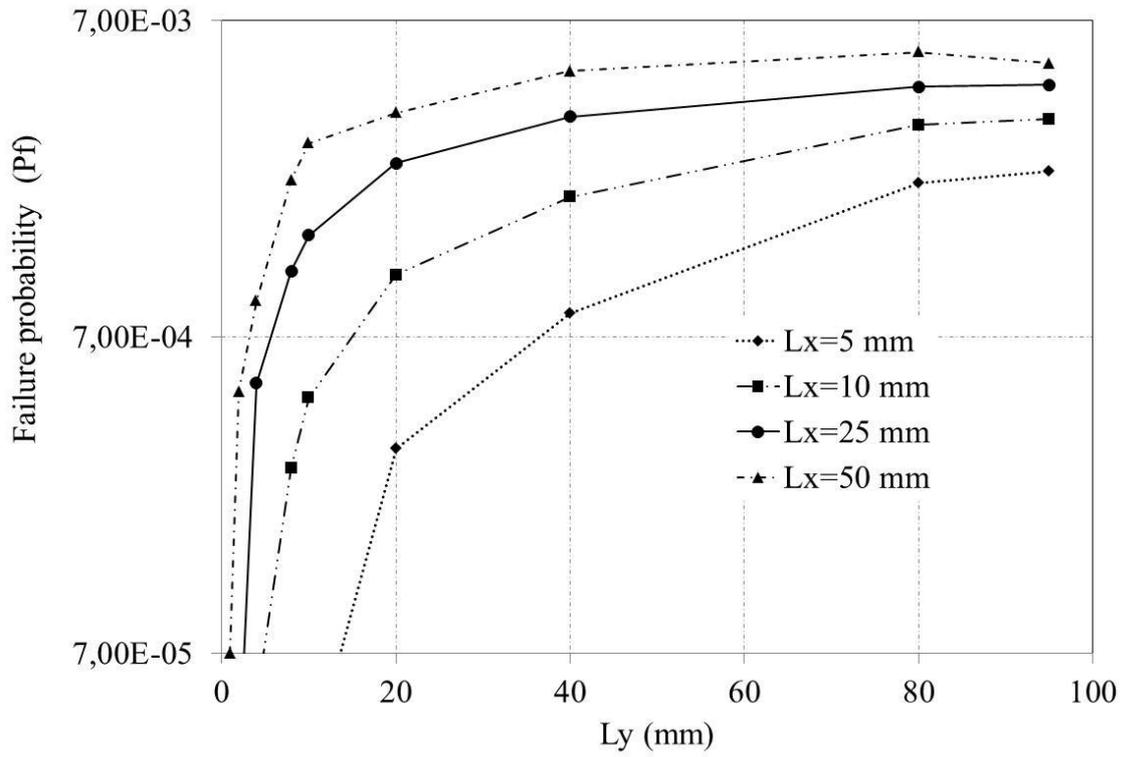


Figure III. 5 Effet de la distance d'autocorrélation horizontale sur la probabilité de défaillance pour différentes valeurs de L_x .

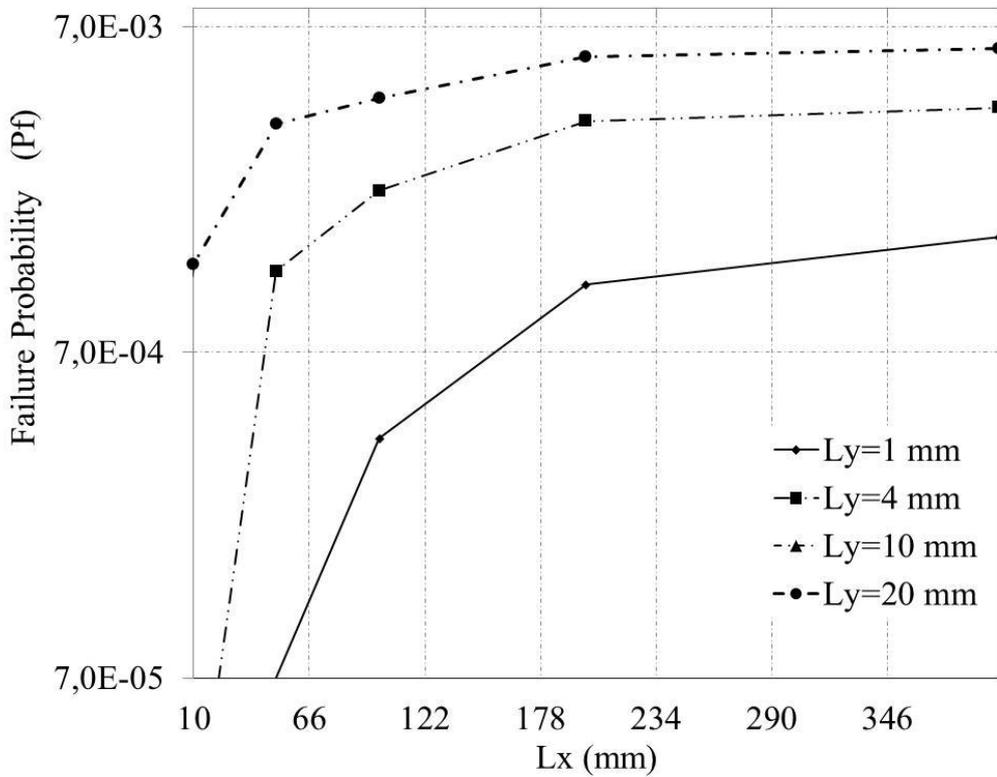


Figure III. 6 Effet de la distance d'autocorrélation verticale sur la probabilité de défaillance.

L'augmentation de la probabilité de défaillance due à l'augmentation de la distance d'autocorrélation peut s'expliquer de la manière suivante: lorsque la distance d'autocorrélation est très grande, le matériau tend à être homogène. Dans ce cas, la réduction de surface a été jugée trop proche de celle obtenue lors de l'étude de matériau homogène. Pour des distances d'autocorrélation plus petites, une hétérogénéité de matériau est obtenue, ce qui entraîne une variabilité des variables aléatoires ayant une influence significative sur la réduction de surface. Dans ce cas, la réduction de surface est importante pour certaines sections importantes des variables aléatoires et faibles pour les autres sections contenant une faible valeur de ces variables.

L'intérêt de cette étude étant de définir l'ordre des distances d'autocorrélation, il convient donc de noter que les configurations utilisées dans cette étude correspondent aux distances d'autocorrélation égales à 50 pour l'axe des x et à 20 pour l'axe des y. Il en sera de même pour les calculs probabilistes effectués pour la présente étude.

III.2.5.2. Etude de la variabilité spatiale et temporelle des distances d'autocorrélation

Dans cette section, la probabilité de défaillance est analysée et interprétée pour différents scénarios. Pour les petites distances d'autocorrélation ($L_x < 25\text{mm}$ et $L_y < 2\text{mm}$), il convient de noter que P_f diminue plus lentement avant le point d'inflexion et s'inverse immédiatement après le point d'inflexion. Il en résulte une hétérogénéité du matériau qui entraîne plus facilement la libération d'hydrogène. Cependant, pour les autres L_x et L_y , nous remarquons que les courbes de P_f diminuent plus rapidement avant le point d'inflexion et diminuent plus lentement juste après ce point, sachant que les tracés sont presque superposés, ce qui explique que le matériau soit moins hétérogène (Figure III.7).

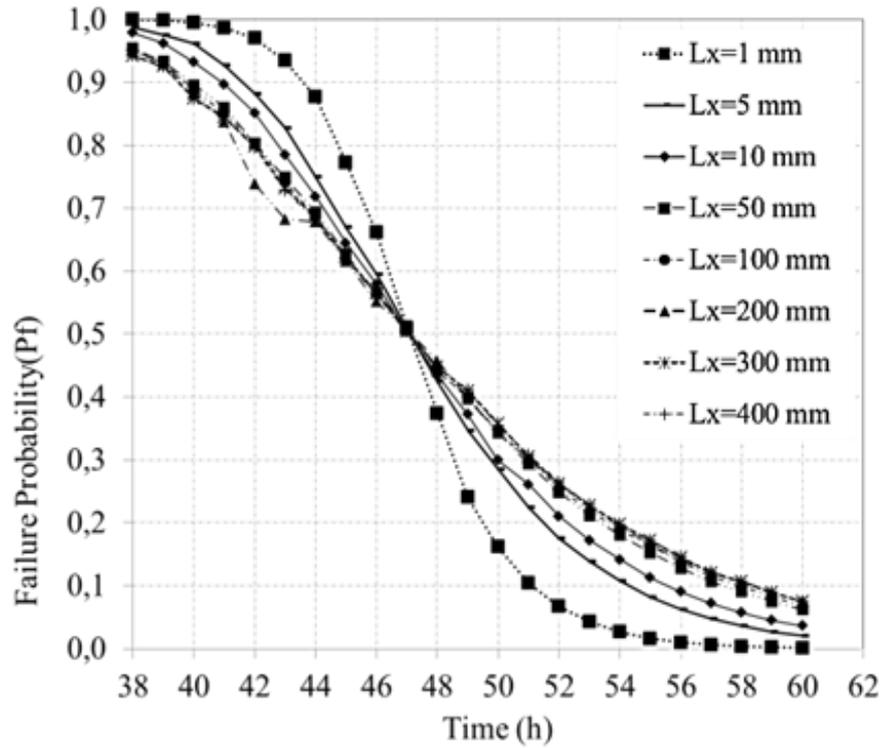


Figure III. 7 Évolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différentes positions de L_x .

Pour les distances d'autocorrélation plus longues ($L_x > 25$ mm et $L_y > 2$ mm), il convient de noter que la probabilité de défaillance décroît relativement rapidement et conserve le même taux pour tous les niveaux de L_x et que la valeur maximale pour L_y est égale à 8 mm, hypothèse que le matériau tend vers l'homogénéité du matériau ce qui freine la fuite d'hydrogène de l'échantillon. Ce résultat ne fait que confirmer le résultat précédent concernant l'homogénéité du matériau concernant les grandes valeurs de distances d'autocorrélation, mais il permet de mieux comprendre l'évolution temporelle, car il nous donne l'apparence suivante de l'analyse une étude en fonction du temps et de variables aléatoires.

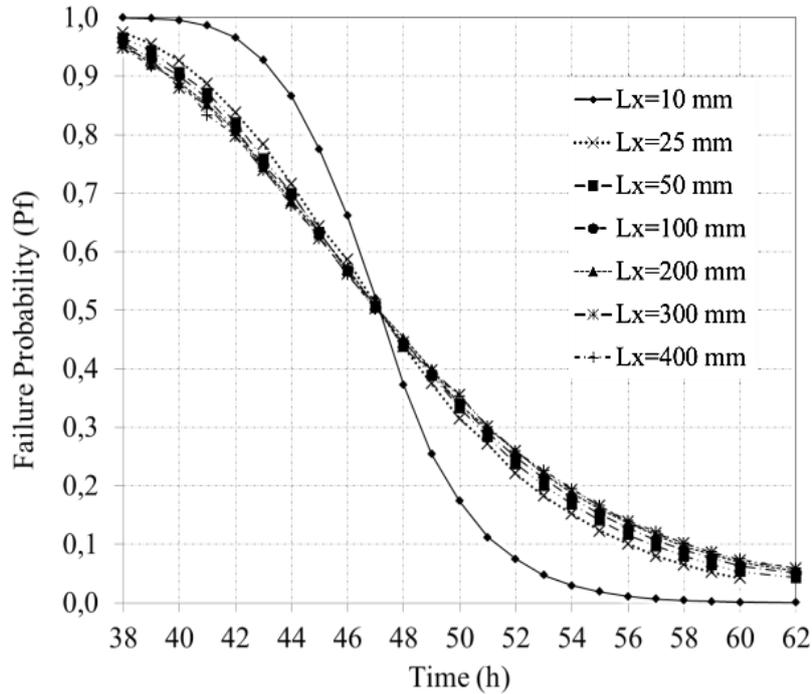


Figure III. 8 Évolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différentes positions de L_y .

III.2.5.3. Optimisation du temps de calcul

Pour l'analyse probabiliste, la méthodologie de simulation de Monte Carlo (MCS) est utilisée généralement pour calculer la fonction de densité de probabilité de la réponse du système PDF ou la probabilité de défaillance Pf. Inspirée d'une méthodologie rigoureuse et robuste, la MCS nécessite un grand nombre d'essais pour le modèle déterministe (environ un million d'échantillons pour une probabilité de défaillance de $1.E-5$) (Ahmed,2013).

Le coefficient de variation de la probabilité de défaillance COV (Pf) a été calculé par le rapport entre l'écart-type et la moyenne et est illustré à la figure III.9 Il a été constaté qu'il diminue avec l'augmentation du nombre de simulations. Il atteint une valeur de coefficient de variation égale à 15% lorsque le nombre de simulations N_s est égal à 10000 simulations (à $Pf = 10^{-3}$).

Pour $N_s = 1.000$ en 1.06 heure pour un calcul qui équivaut à un total de 17 heures pour tous les calculs pour l'intervalle de [20 à 50] heures.

Pour $N_s = 6000$ en 3 heures pour un calcul et il fait un total de 15 heures pour tous les calculs pour l'intervalle de temps [51 à 54] heures.

Pour $N_s = 10\ 000$ en 14,54 heures pour un calcul de 15 heures et fait 87,27 heures pour tous les calculs pour l'intervalle de temps de [54 à 59] heures.

Pour $N_s = 20\ 000$ en 27,06 heures pour un calcul avec un total de 108,25 heures pour tous les calculs pour l'intervalle de temps de [59 à 62] heures.

Pour un nombre de simulations égal à $N_s = 100$ dans un temps de calcul court, mais les résultats ne sont pas fiables, à savoir $COV(P_f) > 20\%$ pour $P_f > 10^{-3}$. Il est donc plus raisonnable de limiter le nombre de simulations à 10 000.

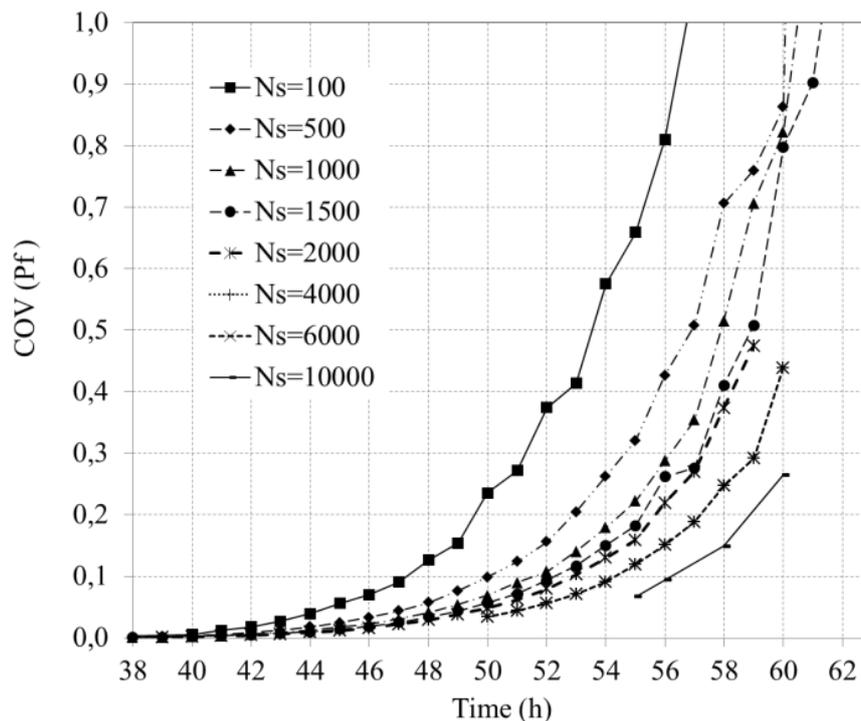


Figure III. 9 Optimisation du temps de calcul par le nombre de simulations en fonction du temps

Afin de gagner plus de temps, il est nécessaire d'associer chaque intervalle de temps de dégazage à un nombre spécifique de simulations, comme indiqué dans le tableau 4, afin d'obtenir le profil typique illustré à la figure III.10. Toutefois, le facteur P_f diminue avec l'augmentation du temps, augmente automatiquement le nombre de simulations pour avoir un P_f fiable.

Tableau III. 4 Temps calculatoire en fonction du nombre de simulations

Intervalle de temps de désorption du H ₂	Nombre de simulations
(20-50)	1000
(51-54)	6000
(56-62)	10000

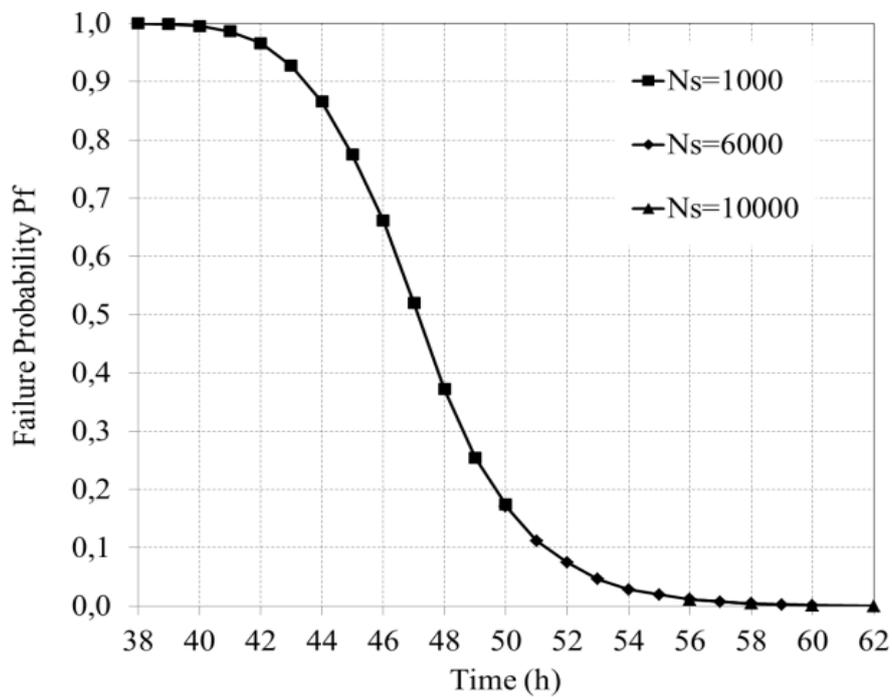


Figure III. 10 Evolution temporelle du Pf en fonction du nombre de simulations

Depuis le fil d'acier utilisé pour le béton précontraint, il est plus raisonnable de le comparer à la probabilité de défaillance du niveau de génie civil en fonction de la courbe de probabilités de niveau estimée dans différentes branches industrielles (Fig. III.11).

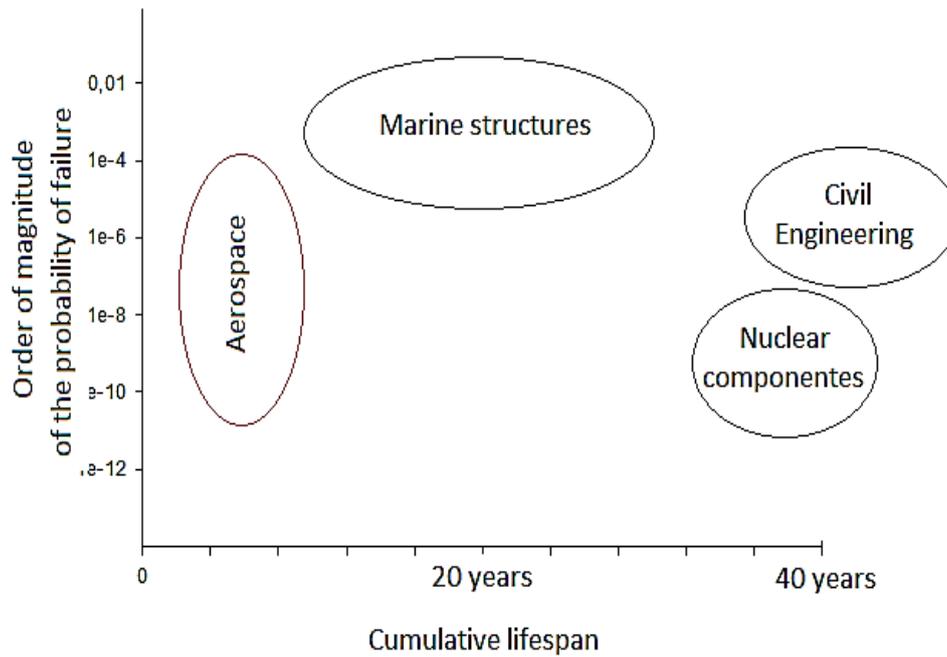


Figure III. 11 Niveau de probabilités estimé dans différentes branches industrielles (Lemair 2009).

III.2.5.4. Etude paramétrique

Dans la sous-section suivante, une analyse de sensibilité basée sur une étude paramétrique de variables aléatoires est réalisée afin de fournir la contribution de chacune de ces variables, à savoir le coefficient de diffusion effectif (D_e) et la concentration à un moment donné (C_∞) sur la variabilité de la réponse du système qu'est la striction (Z). Une étude de la probabilité de défaillance en fonction du temps de stockage de l'acier est réalisée. Ce temps permet la désorption de l'hydrogène des échantillons qui est utilisé dans le béton précontraint selon notre cas. Le critère d'état limite est le critère de la striction qui doit être supérieur ou égal à 30%.

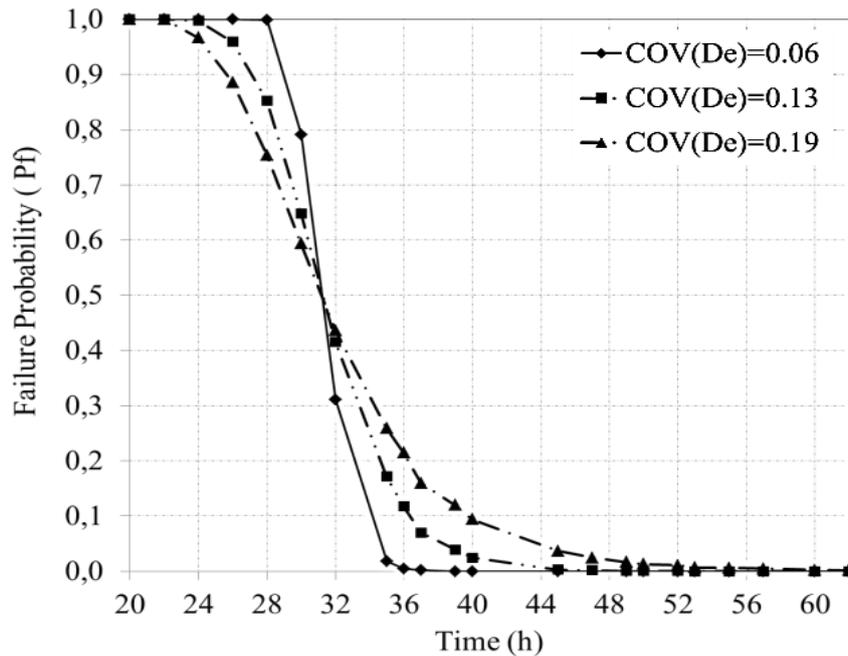


Figure III. 12 Evolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différents $COV(De)$

Pour une faible valeur de $COV(De) = 0.06$, les valeurs de diffusion convergent vers cet effet. Le Pf décroît rapidement contrairement au $COV(De)$ important où les valeurs de diffusion divergent, ce qui explique pourquoi le Pf décroît plus lentement. Pour de grandes valeurs de $COV(De) = 0.19$, les valeurs de diffusion élevées ont précipité le dégagement d'hydrogène, ce qui a accéléré la diminution de Pf avant le point d'inflexion. Cependant, les faibles valeurs de la diffusion ont ralenti l'échappement de l'hydrogène ce qui a réduit la diminution de la probabilité de défaillance après le point d'inflexion. On peut en conclure que la variabilité du coefficient de diffusion tel que les champs aléatoires à un impact significatif sur la probabilité de défaillance. D'où l'importance de cette étude qui prend en compte la variabilité spatiale du matériau.

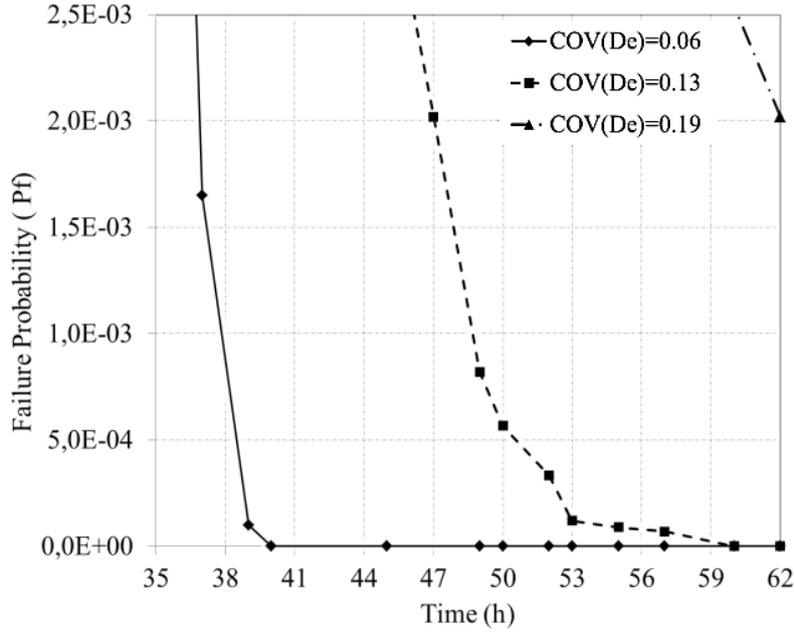


Figure III. 13 Zoom sur l'intervalle de temps de 35 à 62 heures en cas de Pf en fonction du temps

Les résultats de la figure III.14 montrent que la diminution de la probabilité de défaillance pour les trois COV (C_{∞}) commence à 24 heures, puisque la probabilité de défaillance tend à être nulle à 43h.

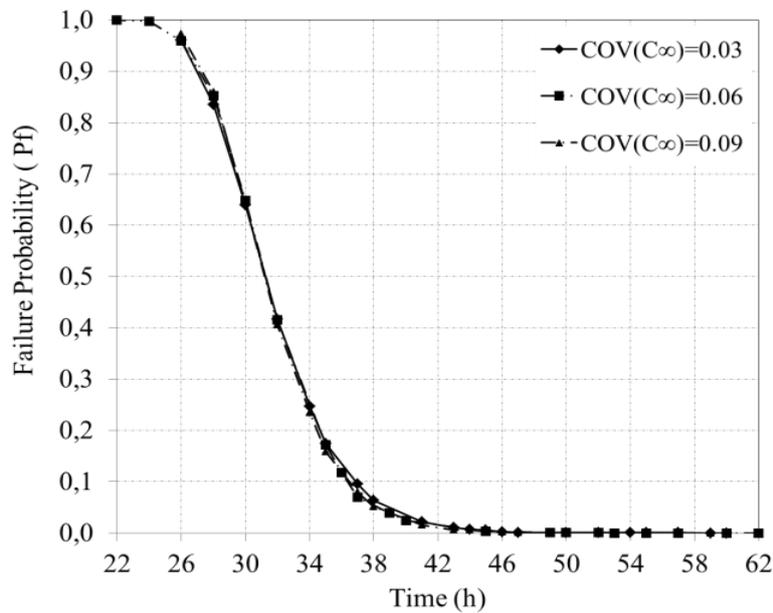


Figure III. 14 Évolution dans le temps de la probabilité de défaillance pour différents COV (C_{∞})

Dans le cas où Pf était estimé sur une échelle normale, c'est-à-dire $0 < Pf < 1$, les courbes du COV (C_{∞}) coïncidaient pratiquement mais étaient réduites à une échelle plus

précise. La valeur Pf est comprise entre 0 et 5.0E-04, dans notre cas Pf est égal à 5.0E-04 et se situe entre 10^{-7} et 10^{-3} en référence à la courbe de Maurice LEMAIR. Il est à souligner que le Pf est toujours inclus dans les intervalles précédant les courbes de niveau, comme indiqué à la Fig. III.11

Il est à noter qu'il existe une différence nette de sorte que la plus grande valeur de COV (C_{∞}) = 0.09 diminue plus rapidement et atteint la probabilité d'échec nulle après 59 heures contre la valeur inférieure de la COV (C_{∞}) = 0.03 qui atteint la probabilité de défaillance zéro après 60 heures (Fig.III.15).

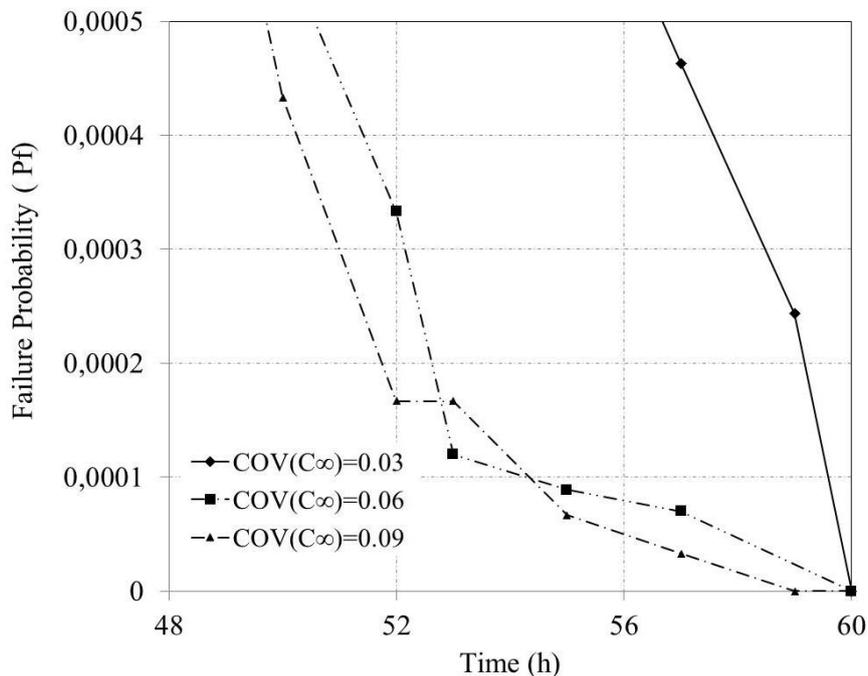


Figure III. 15 Zoom sur l'intervalle de temps de (48-60) heures en cas de Pf en fonction du temps

Le COV de référence qui est égal à 0,06 après 62 heures atteint la probabilité de défaillance nulle. On peut en conclure que le paramètre de concentration a un impact mineur sur le phénomène de désorption de l'hydrogène par rapport au paramètre de diffusion.

III.2.6. Conclusion

Ce chapitre a pour objectif de présenter une analyse probabiliste de la striction dans le cas du phénomène de désorption de l'hydrogène à partir de la tige en acier pour béton précontraint C-Mn avec un coefficient de diffusion effectif (D_e) et une concentration (C_{∞}) variables dans l'espace, à l'aide de la Simulation par la Méthode de Monte Carlo. Le modèle

déterministe était basé sur la seconde loi de Fick qui décrit de manière conventionnelle la diffusion de l'hydrogène dans l'acier. Le modèle tiré a été injecté dans le logiciel Matlab. Les principales conclusions du présent document peuvent être résumées comme suit:

Une étude paramétrique a montré que la variabilité de la striction (Z) était principalement régie par le coefficient de diffusion effectif (D_e). Le paramètre de concentration (C_∞) a un effet mineur sur la variabilité de la réponse du système et ce paramètre peut être considéré comme déterministe. La stratégie de détection des paramètres les plus influents réduit considérablement le temps de calcul de l'analyse probabiliste par simulation du logiciel. L'un des principaux obstacles pratiques à ces méthodes est le temps de calcul qui est considéré très long. Des modèles numériques sont associés au grand nombre de simulations nécessaires à l'application de méthodes probabilistes, d'où l'importance de l'étude d'optimisation du temps calculatoire qui permis de réduire considérablement les coûts de calcul pour la présente étude et pour les perspectives à venir. Cette étude d'optimisation présente également l'avantage de réduire le coût de la recherche expérimentale pour de nouveaux projets similaires, car les paramètres moins influents ne nécessitent pas de recherche expérimentale approfondie sur leur variabilité.

Les champs aléatoires des paramètres (D_e et C_∞) ont été discrétisés en un nombre fini de variables aléatoires en utilisant la discrétisation de Karhunen-Loeve. Le paramètre d'entrée qui a le plus d'impact est le coefficient de diffusion (D_e). En fait, dans une section réduite où les distances d'autocorrélation sont beaucoup plus petites, on note une hétérogénéité du matériau qui a entraîné la variabilité du coefficient de diffusion. L'explication la plus probable est que dans une grande hétérogénéité de surface, il existe davantage de défauts de microstructure à la température ambiante qui facilitent la diffusion de l'hydrogène. Contrairement à une plus grande section, le matériau tend à l'homogénéité impliquant moins de défauts conduisant au ralentissement de la diffusion de l'hydrogène.

L'écart type de la réponse du système augmente avec l'augmentation du coefficient de variation des champs aléatoires des entrées. En ce qui concerne la valeur moyenne, elle reste assez constante pour le paramètre de diffusion.

Enfin, la validation des résultats obtenus est réalisée en comparant ceux-ci à ceux obtenus par Carneiro (2010). Il convient de noter que la durée de stockage optimale déduite pour la désorption de l'hydrogène par l'approche déterministe de Carneiro est supérieure à environ 98 heures pour atteindre la striction requise. Pour l'approche probabiliste et en

particulier pour une probabilité de défaillance égale à 10^{-3} , ce qui signifie une grande précision. La striction requise qui doit être supérieure ou égale à 30% est atteinte pour la durée de stockage de 62 heures. En conséquence, nous obtenons un gain égal à 36 heures de temps de stockage ; cette durée garantit l'obtention de la ductilité requise pour l'utilisation de ce matériau. Cela garantira une économie de temps de stockage et par conséquent un gain économique pour de grandes quantités de cet acier. Cependant, il est souhaitable d'impliquer des méthodes probabilistes dans les études de faisabilité pour une prise de décision plus fiable et plus économique. Ces approches contribuent également à la réduction du coût des futures études expérimentales.

Références bibliographique

- CRANK (J.). – The mathematics of diffusion. Clarendon Press (1975)
- Carneiro Filho- 2010 The effect of hydrogen release at room temperature on the ductility of steel wire rods for pre-stressed concrete; Materials Science and Engineering A
- Lemaire, M.; Chateaufort, A., Mitteau, J.C (2009) Structural reliability. ISTE Ltd. Edition ISBN-13 : 978-1848210820
- Ourrad, S., Houmadi, Y., F.J Belzunce, A. ZIADI, (2016). Numerical analysis of Hydrogen embrittlement of high strength steels using Monte Carlo method. 7th African Conference of Nondestructive Testing Acndt
- Sudret, B., Berveiller, M. (2008). Stochastic finite element methods in geotechnical engineering. In: Reliability-Based design in Geotechnical Engineering: Computations and applications, Taylor & Francis (Eds.), New York, USA, pp. 260-297.
- Spanos, P.D., Ghanem, R. (1991). Spectral stochastic finite element formulation for reliability analysis. Journal of Engineering Mechanics, 117(10): 2351-2372. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(1991\)117:10\(2351\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(1991)117:10(2351))
- Ashraf Ahmed (2013). Probabilistic analysis of shallow foundations: Simplified and advanced approaches for the probabilistic analysis of shallow foundations, LAP Lambert Academic Publishing. ISBN-13: 978-3659323638
- Shewmon, P.G. (1989). Diffusion in Solids, second ed., The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA, USA.
- Son, D.-S., Hong, J.-H., & Chang, S.-H. (2012). Determination of the autofrettage pressure and estimation of material failures of a Type III hydrogen pressure vessel by using finite element analysis. International Journal of Hydrogen Energy, 37(17), 12771-12781. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.06.044>.
- Brandes E. A. et Brook G. B., Smithells Metals, seventh Edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1992 (Reed Educational and Professional Publishing Ltd 1992)

**CHAPITRE IV : Etude De La Susceptibilité De L'acier
42CrMo4 à L'hydrogène**

IV.1. Introduction

Les systèmes à piles à combustible sont un système énergétique potentiel de prochaine génération. Dans ce contexte, la demande accrue d'hydrogène dans les années à venir signifie que les systèmes et matériaux traditionnels utilisés auparavant pour le transport et le stockage de l'hydrogène devraient être adaptés pour permettre de livrer de plus grandes quantités d'hydrogène de manière efficace, en utilisant des pressions d'hydrogène plus élevées, jusqu'à 70 MPa.[Helmont , 2007]

Jusqu'à présent, ce sujet est largement débattu dans la littérature. De nombreux efforts sont faits par les chercheurs pour améliorer et approfondir la connaissance de ce phénomène à travers des études expérimentales et des modélisations à différentes échelles de la fragilisation par l'hydrogène.

Les nouvelles applications dans les domaines de l'énergie nécessitent des problèmes complexes pour des performances opératoires supérieures dans des environnements de travail agressifs, afin d'éviter des conséquences catastrophiques pour l'environnement, l'économie industrielle et la santé du personnel

Outre, une connaissance complète du comportement mécanique des matériaux métalliques directement au contact de l'hydrogène, et en particulier une quantification de l'influence de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des aciers, est certainement une nécessité pour une conception correcte de ces composants et structures, ainsi que pour un entretien correct.

La meilleure solution économique serait l'utilisation d'aciers à résistance moyenne et élevée afin de réduire l'épaisseur des tuyaux et des récipients et donc le coût des matériaux. 42CrMo4 appartient à la famille du Cr-Mo et sont fréquemment trompés et revenus de sorte à avoir une combinaison de résistance et d'épaisseur requises. Cependant ces aciers sont plus sensibles à la fragilisation par l'hydrogène (FPH) que les aciers à faible résistance, et cette sensibilité augmentent avec le niveau de résistance

Bien que les effets délétères de l'hydrogène sur les aciers trempés et revenus similaires à 42CrMo4 été étudiés depuis un certain temps, une compréhension complète du problème fait encore défaut [Wang, 2007]. De plus, la relation quantitative entre la microstructure de l'acier, la teneur en hydrogène de l'acier et la diminution des propriétés de traction et la ténacité à la rupture a rarement été rapportée. Dans ce contexte, l'objectif principal de cette étude est d'analyser les influences du niveau de résistance et de la microstructure dans la sensibilité à la fragilisation par l'hydrogène de l'acier mentionné

La sensibilité des aciers ferritiques à haute résistance à la fracture assistée par l'hydrogène dans l'hydrogène gazeux est généralement évaluée au moyen d'essais mécaniques dans l'hydrogène gazeux à haute pression ou d'essais à température ambiante après avoir pré-chargé les échantillons.

Nous avons utilisé cette deuxième méthodologie, pour charger les échantillons d'hydrogène gazeux à haute température.

IV.2. Méthodologie

IV.2.1. Composition chimique du matériau

Des plaques laminées à chaud (250x250x12 mm³) en acier 42CrMo4 ont été austénitisées à 845°C pendant 40 min, trempées dans l'eau, puis revenu de 500 (42CrMo4_500) jusqu'à 700°C (42CrMo4_700) pendant 2h.

Tableau IV. 1 composition chimique de l'acier 42CrMo4 (poids %)

%	C	Mn	Si	P	S	Cr	Mo
Acier							
42CrMo4	0.42	0.62	0.18	0.008	0.002	0.98	0.22

IV.2.2. Microscopie électronique à balayage

L'équipement utilisé a été le microscope électronique à balayage JEOL-JSM5600 avec microanalyse EDX incorporé, des services scientifiques et techniques de l'Université d'Oviedo et situé dans le laboratoire de science des matériaux, de l'école polytechnique de Gijón (**Figure IV. 1**).



Figure IV. 1 MEB Equipement du microscope à balayage électronique JEOL-JSM5600

IV.2.3. Chargement des éprouvettes par l'hydrogène

Il existe trois méthodes basiques pour l'analyse des effets de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des aciers:

1. Essai d'éprouvettes d'acier directement sous une forte pression d'hydrogène (application de la charge mécanique en même temps que l'éprouvette est exposée à l'hydrogène gazeux).
2. Essai à l'air libre d'éprouvettes pré-chargés par électrolyse cathodique en solution acide aqueuse.
3. Essai à l'air d'éprouvettes pré-chargées d'hydrogène par chargement d'hydrogène sous pression, à l'aide d'un réacteur chargé d'hydrogène à haute pression et température.

L'utilisation de la pré-charge d'hydrogène à l'aide d'un réacteur à hydrogène sous pression présente l'avantage de pouvoir utiliser une température supérieure à la température ambiante. Étant donné la variation exponentielle du coefficient de diffusion avec la température, la cinétique d'entrée d'hydrogène dans l'acier peut être considérablement accélérée, de sorte qu'au bout de quelques heures, nous pouvons atteindre des niveaux d'hydrogène similaires à ceux que nous aurions après des années de service à température ambiante. En revanche, le principal inconvénient de cette forme d'action réside dans la nécessité de réaliser l'essai mécanique juste après la charge d'hydrogène (une fois l'échantillon refroidi) afin de limiter son échappement (Zafra, 2017). Les paramètres de pré-chargement utilisés sont indiqués dans le tableau IV.2 :

Tableau IV. 2 Paramètres de charge d'hydrogène dans l'autoclave ITMA

Pression	Température	Temps	Conditions de refroidissement		
			Refroidissement contrôlé à 80 ° C	1h	195bar
190-200 bar	450°C	21h			

IV.2.4. Transport des échantillons

Une fois extraits de l'autoclave, les échantillons ont été immédiatement immergés dans de l'azote liquide (-196 ° C) pour empêcher la libération d'hydrogène, car à cette température le processus de diffusion est extrêmement lent. Le conteneur illustré à la figure IV.2 a été utilisé pour le transporter dans l'azote liquide. La durée moyenne de transport de l'ITMA au laboratoire de science des matériaux du PEV de Gijón était d'environ 30 minutes.

Une fois au laboratoire, il est nécessaire de procéder à l'extraction des échantillons d'azote liquide pour effectuer les tests (figure IV.2).

Pour que la condition de température ambiante nécessaire soit remplie lors des essais de traction et de rupture et ainsi éviter les effets de fragilisation des basses températures, Il est nécessaire de laisser les spécimens se réchauffer à l'air. Avec le logiciel d'éléments finis Abaqus CAE [Zafra, 2017], un coefficient de convection $h = 22\text{W} / \text{m}^2\text{K}$ a été estimé entre la surface de l'échantillon et l'air calme du laboratoire. Le temps de chauffage estimé des spécimens de -196°C à 10°C en surface était de 13min, donc en règle générale, pour s'assurer que le centre des spécimens n'était pas trop froid, on les laissait se réchauffer à l'air pendant 20-25 min avant de commencer le test.

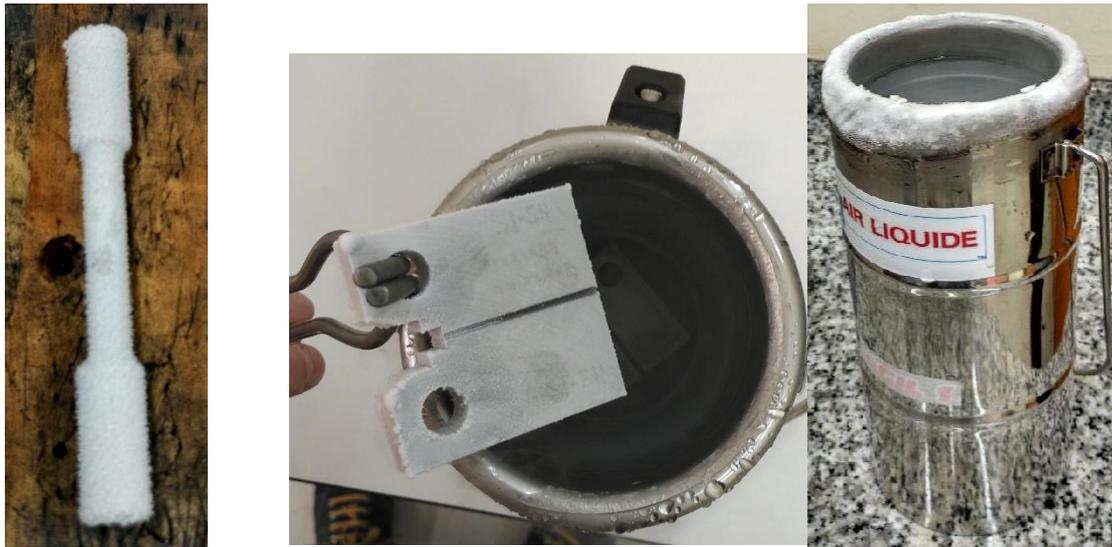


Figure IV. 2 Eprouvette de traction (à gauche) et de rupture (au centre) fraîchement extraits de l'azote liquide et conteneur utilisé pour le transport (à droite)

IV.2.5. Mesure de la teneur en hydrogène

L'équipement utilisé pour mesurer la teneur en hydrogène des échantillons et effectuer les profils d'évolution de l'hydrogène était l'analyseur d'hydrogène Leco DH-603 illustré sur la figure IV.3. Celui-ci permet de mesurer des concentrations d'hydrogène entre 0,1 et 2500 ppm.

La base de mesure de l'équipement est basée sur la différence de conductivité thermique entre un flux de gaz de référence d'azote pur et un flux de gaz vecteur qui, en plus de l'azote, contient l'hydrogène extrait de l'échantillon. Pour mesurer cette différence de conductivité et la traduire en une différence de potentiel qui peut être interprétée par le logiciel (qui nous donne finalement les milligrammes d'hydrogène), l'équipe utilise un pont de Wheatstone.



Figure IV. 3 Analyseur d'hydrogène LECO DH-603 utilisé pour mesurer la teneur en hydrogène

Les microstructures SEM des 5 nuances d'acier 42CrMo sont représentées sur la figure 10 sous un agrandissement de 10000x.

IV.2.6. Courbes de désorptions de l'hydrogène

La désorption de l'hydrogène à température ambiante de chaque nuance d'acier est illustrée sur la figure IV.4.

Ces chiffres représentent la teneur totale en hydrogène de chaque échantillon par rapport au temps d'exposition à température ambiante. La teneur initiale en hydrogène de chaque échantillon, C_{H_0} , correspond aux premiers points des courbes. L'hydrogène résiduel, C_{H_f} , est l'hydrogène fortement piégé dans la microstructure en acier.

La teneur en hydrogène après une longue exposition à température ambiante, étant l'hydrogène diffusible la quantité qui peut sortir des pièges et se diffuser à long terme hors de l'acier avec la relation $(C_{H_0}-C_{H_f})$ où C_{H_0} .

La concentration initiale de l'hydrogène initialement et C_{H_f} représente la concentration finale plus précisément à un instant « t » choisi. En parallèle avec les changements microstructuraux, lorsque la température de revenu augmente, les teneurs initiale et résiduelle en hydrogène diminuent (il y a une densité plus faible de pièges et de pièges forts).

La figure IV.4 montre les résultats obtenus avec les quatre nuances d'acier.

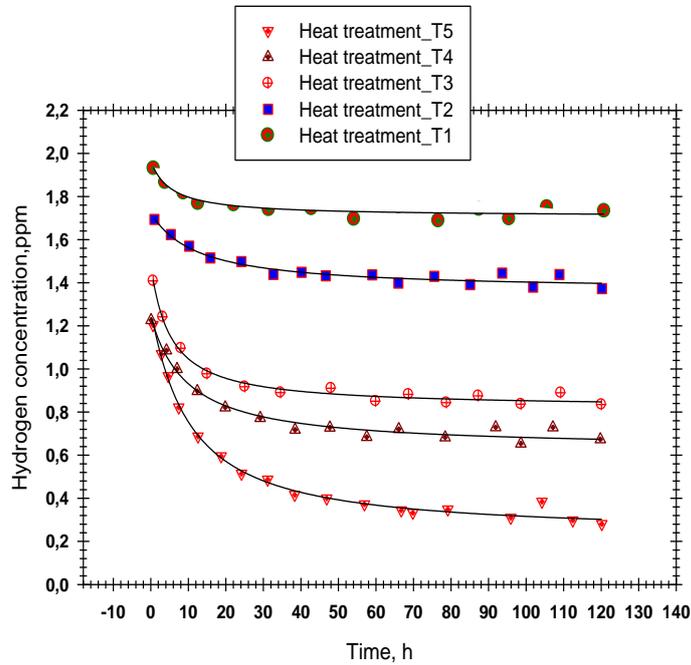


Figure IV. 4 Courbes de désorption de l'hydrogène, $T_5=700^{\circ}\text{C}$, $T_4=650^{\circ}\text{C}$, $T_3=600^{\circ}\text{C}$, $T_2=550^{\circ}\text{C}$, $T_1=500^{\circ}\text{C}$

IV.2.7. Microstructures de l'acier utilisé

La microstructure a été observée à l'aide du microscope électronique à scanner SEM JOEL-JSM5600) en utilisant un accélérateur de voltage de 20kv(les échantillons ont été polis avec du papier verre de $1\mu\text{m}$)

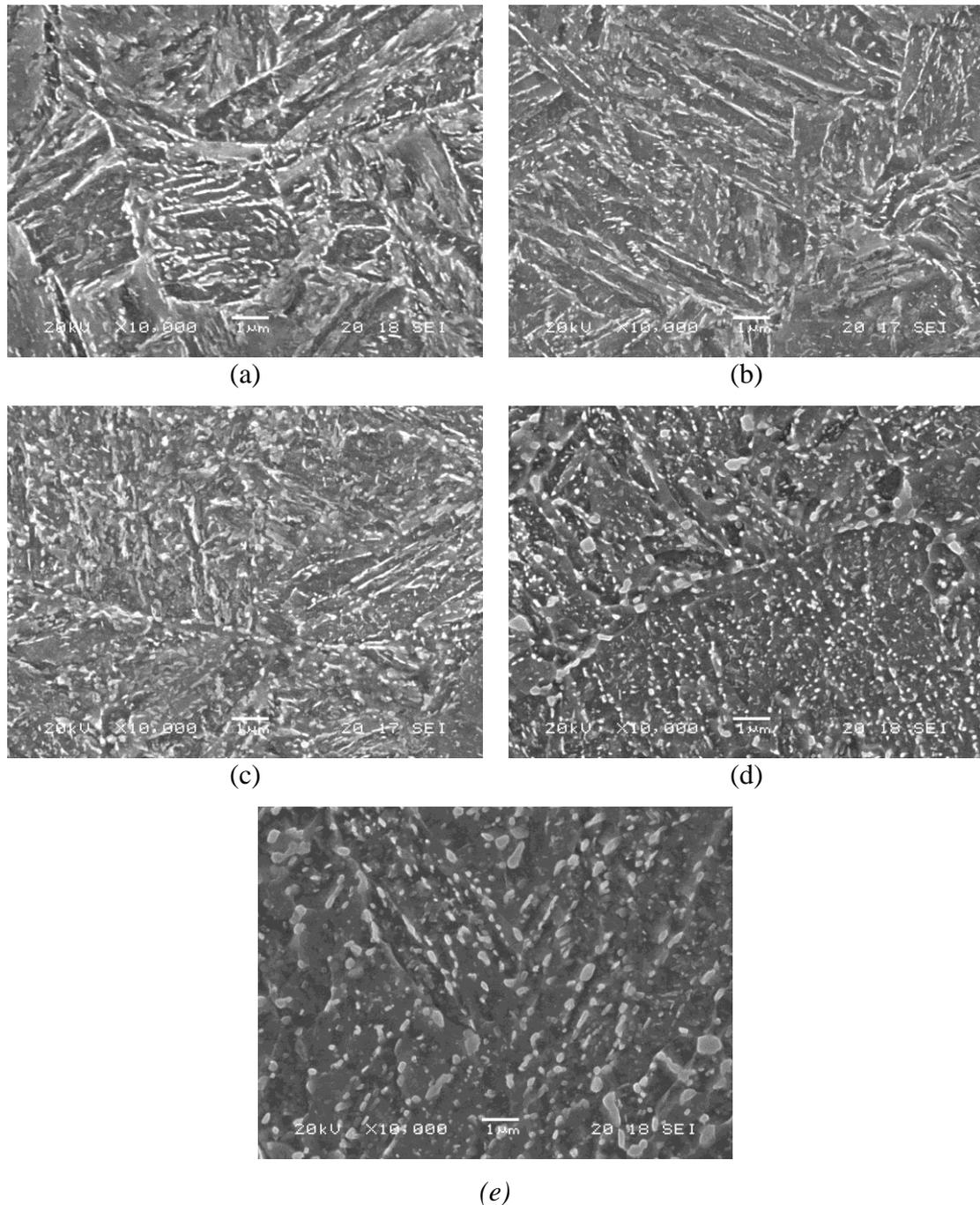


Figure IV. 5 Microstructures SEM en acier 42CrMo4, trempé et revenu à (a) 500°C, (b) 550°C, (c) 600°C, (d) 650°C et (e) 700°C (10000x).

Les différents traitements thermiques donnent naissance à différents matériaux dont les propriétés mécaniques sont énumérées dans le tableau IV.3.

Tableau IV. 3 Propriétés mécaniques de l'acier 42CrMo4

éprouvettes	Traitement thermique	HB	σ_e [MPa]	σ_u [MPa]	ϵ [%]	A [%]
42CrMo4_700	845°C+WQ+T700°C/2h+AC	201	622	710	22.4	61.3
42CrMo4_650	845°C+WQ+T650°C/2h+AC	246	820	905	16.3	57.1
42CrMo4_600	845°C+WQ+T600°C/2h+AC	281	880	985	14.6	55.4
42CrMo4_550	845°C+WQ+T550°C/2h+AC	307	1023	1113	13.9	48.9
42CrMo4_500	845°C+WQ+T500°C/2h+AC	335	1086	1198	12.7	50.6

Toutes ces microstructures correspondent à de la martensite trempée. La précipitation abondante de carbures qui se produit pendant l'étape de revenu est clairement visible. À mesure que la température de revenu augmente, des contraintes résiduelles internes sont libérées, des phénomènes de recristallisation se produisent, la densité de dislocation et les limites des lattes de martensite diminuent. De plus, la taille des carbures augmente, ce qui donne lieu à une distribution plus uniforme des carbures [Krauss, 2005]. De plus, à mesure que la température de revenu augmente, la dureté et la résistance de l'acier diminuent, tandis que l'allongement augmente.

De plus, les carbures allongés se brisent, et finalement poussent pour donner une distribution plus uniforme.

Il est bien connu que la fragilisation par l'hydrogène augmente avec le niveau de résistance de l'acier [Peral, et al 2017], donc les nuances trempées et revenues à des températures plus basses devraient être plus sensibles à la fragilisation par l'hydrogène.

IV.3. Conclusion

La susceptibilité à la fragilisation par l'hydrogène de l'acier 42CrMo4 soumis à divers traitements thermiques a été évaluée dans ce travail et les conclusions suivantes peuvent être tirées.

La pré-charge thermique de l'hydrogène effectuée à 450 °C sous une pression d'hydrogène de 19,5 MPa s'est avérée être une méthode appropriée pour étudier la fragilisation par l'hydrogène des aciers à l'aide d'échantillons pré-chargés. La teneur initiale en

hydrogène est de 0,6-1,9 ppm et la teneur en hydrogène résiduel après un grand séjour à la température ambiante est de 0,2-1,4 ppm.

À mesure que la température de revenu des aciers trempés et revenus augmente, des contraintes résiduelles sont libérées des phénomènes de recristallisation se produisent.

La densité de dislocation et les limites des lattes de martensite diminuent, les carbures précipitent, leur taille augmente ce qui donne lieu à une distribution plus uniforme des carbures.

En raison de tous ces changements microstructuraux, la microstructure en acier gagne en capacité de stockage et de rétention d'hydrogène (les teneurs en hydrogène initial et résiduel augmentent) mais la quantité d'hydrogène diffusible diminue.

L'acier trempé et revenu à 650 ou 700°C serait le plus approprié pour la fabrication de composants qui assurent un service sûr et prolongé au contact de l'hydrogène gazeux à haute pression.

Study of the Susceptibility of 42CrMo4 Steel to Hydrogen

The objective of this part is to study the susceptibility of 42CrMo4 (AISI4140) steel, quenched and tempered at different temperatures, to the phenomenon of hydrogen embrittlement.

Tempering temperatures of 500, 550, 600, 650 and 700°C have been used to analyze the impact of the presence of hydrogen on the mechanical properties according to steel's microstructure.

As a result of all these microstructural changes, the steel microstructure gains in hydrogen storage and retention capacity (initial and residual hydrogen contents increase), but the amount of diffusible hydrogen decreases.

Références Bibliographique

George Krauss, 2005 “Steels: Processing, Structure and Performance

Peral L.B., A. Zafra, C. Rodriguez, J. Belzunce, 2017 “Evaluation of strength and fracture toughness of ferritic high strength steels under hydrogen environments”, *Procedia Structural Integrity*, Vol. 5, pp. 1275-1282.

R. Von Helmont and U. Eberle, 2007 “Fuel cell vehicules”, *J. Power Sources*, 165, 833-843

Wang M., Akiyama E., and Tsuzaki K., 2007, “Effect of hydrogen on the fracture behavior of high strength steel during slow strain rate test”, *Corros. Sci.*, 49, pp. 4081–4097.

**CHAPITRE V : ANALYSE DE L'EFFET DE LA
TEMPERATURE DE REVENU SUR LE TEMPS ET LA
CONCENTRATION DE DESORPTION DE
L'HYDROGENE PAR LES RESEAUX DE NEURONES
ARTIFICIELS**

V.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous détaillons les règles d'ajustement et de lissage qui sont appropriées au type de réseau sélectionné et qui rentrent dans notre objectif de réalisation d'un modèle de prédiction de la température de revenu et du temps optimal afin de réduire la concentration. L'évolution des techniques et des procédés, la recherche des rendements les plus élevés, la réduction des coûts font que les matériaux peuvent être amenés à travailler dans des conditions plus difficiles pour l'hydrogène à une pression élevée jusqu'à 70 MPa d'où le développement de l'acier à haute résistance. Des changements importants dans les aciers, dans les techniques de développement et de transformation, dans leur mise en œuvre impliquent toujours de nouvelles études (Brass et al, 2000). De plus en plus, les utilisateurs de pièces métalliques, de réacteurs ou de structures sensibles à l'hydrogène souhaitent disposer de techniques fiables. Modèles de prévision, de surveillance et de contrôle de l'évolution de l'hydrogène pour éviter les dommages en service (Brass et al, 2000).

Les situations pouvant conduire à des phénomènes de fragilisation par l'hydrogène sont nombreuses, telles que la pénétration de ce gaz lors de la production ou de la conversion et les opérations de traitement de l'hydrogène résultant de réactions de corrosion (environnements aqueux).

La fragilisation par l'hydrogène peut se manifester sous différentes formes en fonction de l'état du matériau de sa composition microstructurale et des conditions de stress et d'environnement. L'acier 42CrMo4 est un acier allié à teneur moyenne en carbone, généralement utilisé pour la trempe et le revenu lorsqu'il nécessite une combinaison optimale de résistance et de ténacité. En outre, il offre une résistance élevée à la fatigue et à l'usure, ce qui en fait un excellent candidat pour la conception de produits de fabrication, par exemple des conteneurs pour stocker et transporter de l'hydrogène gazeux à haute pression. Cependant, il est connu que l'acier à haute résistance, comme le 42CrMo4, est sujet à la fragilisation par l'hydrogène et qu'en outre, la sensibilité est proportionnelle à l'augmentation de la résistance mécanique de l'acier (Chuang 1998, Wang 2007, Zafra et al, 2018).

V.2. Méthodologie

La collecte et la préparation des données des échantillons constituent la première étape de la conception du modèle ANN.

Compte tenu du fait que la création d'un réseau neuronal fiable nécessite l'existence d'un ensemble exact et que 48 données ont été réalisées dans le laboratoire des sciences des matériaux de l'école polytechnique supérieure d'ingénierie de Gijón en Espagne, les données sont résumées dans le tableau V 1. Ce dernier contient les données qui sont la concentration (ppm), la température (degré Celsius) et le temps (heure) où ces valeurs représentent le dégagement d'hydrogène de l'acier dont la composition chimique doit être exprimée en pourcentage.

Ce sont C (0,42), Mn (0,62), Si (0,18), Cr (0,98), Mo (0,22), Cu (0,02), V (0,01). Cet acier est soumis à un traitement thermique appelé trempe et revenu à des températures différentes de 500°C à 700°C, avec un pas de 50°C, pendant une durée approximative de 700 heures pour l'acier 42CrMo4 (AISI4140), ce qui permet d'analyser une série de 48 échantillons. Une analyse statistique descriptive a été réalisée pour obtenir les informations et l'influence des paramètres pris en compte dans la présente étude.

Tableau V. 1 Base de données utilisée dans la modélisation par RNA où "t" est le temps de désorption et "C_{h2}" est la concentration de l'hydrogène et "T" est la température de revenu (Zafra et al, 2018)

t (h)	C _{h2} (ppm)	T (°C)			
4.53871	1.84374	500	48.2689	0.919285	600
7.18093	1.78155	500	118.915	0.842879	600
30.7488	1.78171	500	217.498	0.773619	600
50.3351	1.92324	500	286.404	0.704778	600
52.9816	1.84974	500	336.198	0.756859	600
118.489	1.74274	500	386.776	0.692048	600
143.415	1.61284	500	0.01	1.21029	650
215.473	1.49459	500	0.965329	0.910553	650
287.497	1.46682	500	6.24992	0.80879	650
385.63	1.64283	500	28.6589	0.509204	650
479.91	1.62088	500	52.3256	0.351015	650
625.343	1.36175	500	119.239	0.277966	650
0.001	1.7205	550	214.993	0.233398	650
0.58	1.6	550	287.096	0.30743	650
117.43	1.36	550	552.037	0.247092	650
311.72	1.3	550	0.45787105	1.2052991	700
454.75	1.13	550	8.163819	0.81037194	700
503.9	1.01	550	31.61596	0.5055904	700
696.014	0.95	550	54.25522	0.3587637	700
0.01	1.4139	600	119.69149	0.27932772	700
1.3136	1.15748	600	219.18307	0.23349784	700
2.14648	1.10469	600	289.91522	0.30821297	700
24.7098	0.93093	600	456.626	0.28071257	700
			554.3761	0.24617706	700

Pour permettre l'analyse statistique descriptive étendue aux limites du domaine de la modélisation, il est garanti que la valeur extrême (valeurs minimum et maximum) de chaque composant de la base de données totale est incluse dans la base de données descriptive.

La valeur maximale, la valeur minimale sont illustrées sur le Tableau V.2 qui affiche les paramètres statistiques des données utilisées pour l'analyse statistique, où "t" : représente la désorption temporelle, "C_{h2}": représente la concentration en hydrogène , "T": représente la température de revenu et "N": représente le nombre de variables.

Tableau V. 2 Les variables statistiques

Statistiques					
	N	Min	Max	Moyenne	Ecart type
t	47	0.01000	696.014	199.12786	201.414483
C_{h2}	48	0.23339	1.92324	0.9969438	0.55178585
T	48	500	700	596.87	73.228

,V.2.1. Analyse statistique par régression linéaire multiple (MLR)

Afin de mieux estimer l'influence de chaque paramètre, une analyse de régression a été réalisée afin de rechercher des paramètres plus significatifs et de développer de nouveaux modèles de prévision pour avoir un taux minimum d'erreurs.

La forme générale du modèle théorique de régression linéaire multiple s'écrit comme suit (Alayat H et al, 2018):

$$Y = A_0 + A_1 X_1 + A_2 X_2 + \dots + A_n X_n + \varepsilon$$

avec:

Y - Variable dépendante (expliquée);

X₁,... X_n - Variable indépendante (prédite);

A₀,... A_n - Paramètres du modèle estimés à l'aide de la méthode des moindres carrés;

-ε résidus

La qualité de l'ajustement est évaluée à l'aide du coefficient de corrélation R.

Dans cette étude, le rendement (efficacité) donne les résultats nécessaires pour adapter un modèle linéaire multiple afin de lier plusieurs facteurs et de choisir le meilleur modèle pour décrire la relation entre la concentration «C_{h2}» et deux variables indépendantes, à savoir le temps «t» et la température de revenu. "T".

L'équation du modèle de régression linéaire multiple, ajusté pour décrire la relation entre la Concentration et 2 variables explicatives est la suivante:

$$C_{h_2} = 5,1685 - 0,000902805 * t - 0,00669404 * T$$

La valeur du paramètre statistique obtenu P, inférieure à 0,05, conduit à l'existence d'une bonne relation entre les variables de niveau fiable estimé à 95,0%. Le paramètre statistique R-carré indique que le modèle ajusté représente 85,0465% de la variabilité de la concentration en hydrogène. La statistique ajustée du R-carré, qui convient mieux à la comparaison de modèles avec différents nombres de variables, est de 84,3819%. L'erreur type d'estimation indique que l'écart-type des résidus est de 0,218063. L'erreur absolue moyenne de 0,158325 est la valeur moyenne des résidus. Les tests statistiques de Durbin-Watson (DW) = 0,824472 les résidus permettant de déterminer s'il existe une valeur significative. La corrélation basée sur l'ordre dans lequel ils apparaissent dans le fichier de données. Étant donné que la valeur de probabilité est inférieure à 0,05, cela indique une possible autocorrélation en série des résidus au niveau de confiance de 95,0%.

Pour s'assurer que le modèle peut être simplifié, il faut noter que la valeur de probabilité la plus élevée pour les variables explicatives est 0,0000 et est associée au temps. Comme la valeur de probabilité est inférieure à 0,05, ce terme est statistiquement significatif au niveau de confiance de 95,0%. La dispersion des données est illustrée sur la figure V.1 et donc les variables impliquées dans la désorption de l'hydrogène sont considérées comme corrélable

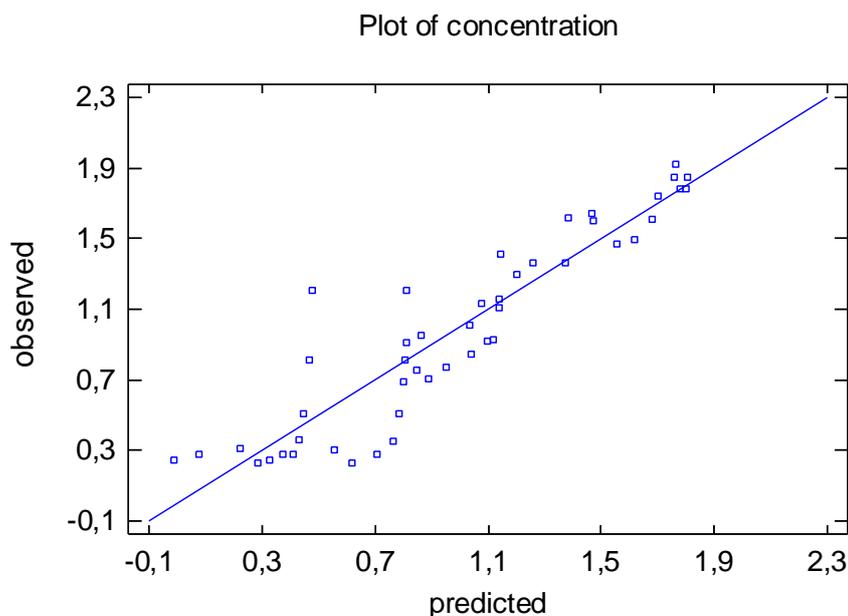


Figure V. 1 Variation de la concentration en fonction de la température de revenu et du temps de désorption.

V2.2. Préparation des ensembles de données de formation, de validation et de test

Habituellement, l'ensemble complet contenant tous les ensembles de données disponibles du comportement du système est divisé en trois sous-ensembles, appelés sous-ensemble de formation, sous-ensemble de validation et sous-ensemble de test. Le sous-ensemble de formation est composé de 70% d'échantillons aléatoires à partir de la base de données. En revanche, le sous-ensemble de validation est composé de 15 % de l'ensemble de la base de données ; il permet de vérifier si les capacités du réseau pour les solutions de généralisation sont à des niveaux acceptables. On utilise donc 15% de l'ensemble complet des données pour estimer les performances du modèle de prédiction.

La formation du réseau a été effectuée par l'algorithme de Levenberg Marquardt afin d'ajuster les poids et l'efficacité de la formation. Les poids sont ajustés pour que les éléments de sortie (prédicatifs) se rapprochent des éléments de sortie cibles (mesurés dans les expériences) et de la somme des poids et biais modifiés. La formation du réseau a ensuite été modifiée par la fonction de transfert tansigmoïde. De la même manière, la sortie de la couche cachée a été modifiée par un poids approprié et la somme du signal de sortie a été modifiée à nouveau par la fonction de transfert tansigmoïde. Une fois le processus de formation terminé, la validation du réseau de neurones est effectuée.

Le réseau de neurones est testé pour déterminer la performance du modèle ANN afin de prédire les paramètres de performance. Il est assuré que les valeurs extrêmes (valeurs minimales et maximales) de chaque composant de toutes les données sont intégrées dans toutes les données d'apprentissage, toutes les données de validation et d'essai, valeur maximale, valeur minimale, écart moyen et écart-type de chaque paramètre. De plus, une procédure de corrélation bi-variée calcule le τ -b de Kendall avec le niveau de signification utilisé. Les corrélations mesurent la relation entre les variables ou les ordres de classification. Une procédure de corrélation bi-variée calcule les associations par paires pour les variables définies (temps / concentration, température / concentration). Il en résulte que la courbe de concentration estimée de l'hydrogène en fonction de la variable dépend d'autres variables indépendantes (paramètres ci-dessus) : établis.

Les représentations du diagramme de dispersion montrent la courbe d'estimation comparée aux paramètres déjà cités. La procédure d'estimation de courbe produit des statistiques de régression d'estimation de courbe et des diagrammes connexes pour cinq (05) modèles d'estimation de courbe. Un modèle distinct est produit pour chaque variable

dépendante. L'estimation de la courbe la plus appropriée est celle où la relation entre la variable dépendante (concentration) et la variable indépendante (temps, température) n'est pas nécessairement linéaire. Le coefficient de corrélation R est le paramètre le plus important qui estime la proportion de la variation totale de la série expliquée par le modèle. Pour chaque modèle (linéaire, logarithmique, quadratique, puissance, exponentielle), nous calculons le R^2 comme est indiqué dans les figures V.2 et V.3. Selon le tableau V.3, le modèle quadratique est celui qui convient le mieux.

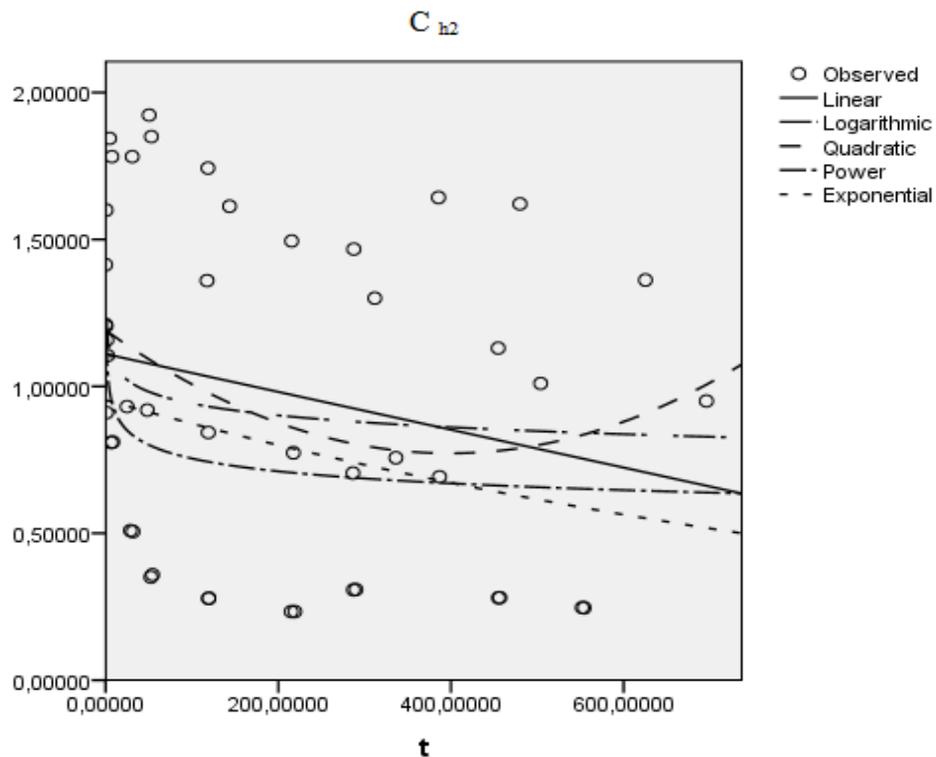


Figure V. 2 Estimation du coefficient de corrélation R^2 pour différents modèles de régression pour le cas où « C_{H_2} » est la variable dépendante et « t » est la variable indépendante

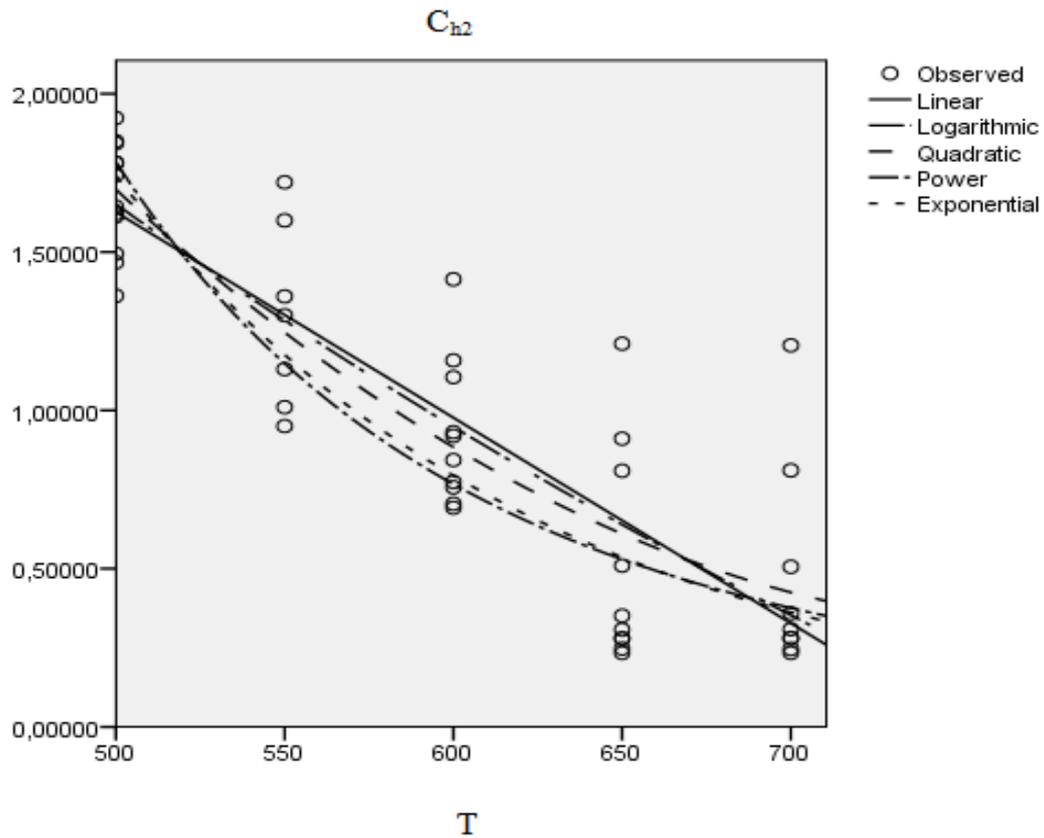


Figure V. 3 Estimation du coefficient de corrélation R^2 pour différents modèles de régression dans le cas où C_{h_2} est la variable dépendante et T est la variable indépendante

Tableau V. 3 Estimation du coefficient de corrélation R^2 pour différents modèles de régression pour le cas où « C_{h_2} » est la variable dépendante et « t » est la variable indépendante

Equation	R^2
Linéaire	0.743
Logarithmique	0.752
Quadratique	0.762
Puissance	0.669
Exponentielle	0.672

Tableau V. 4 Estimation du coefficient de corrélation R^2 pour différents modèles de régression dans le cas où C_{h_2} est la variable dépendante et T est la variable indépendante

Equation	R^2
Linéaire	0.056
Logarithmique	0.082
Quadratique	0.087
Puissance	0.109
Exponentielle	0.063

La figure III.14, montre que la courbe correspond à la meilleure courbe, ce qui donne une évaluation visuelle rapide de l'ajustement de chaque modèle aux valeurs réelles. Il apparaît que le modèle quadratique suit la forme des meilleures données. En outre il est montré qu'aucun modèle ne correspond à la forme de données qui confirme les résultats du R^2 trouvés pour chacun des cinq modèles qu'ils présentent $R^2 < 70\%$.

V.2.3. Prétraitement des données pour ANN

Dans cette étape, la connaissance de la base de données réduit leurs complexité et offre de meilleures conditions ; ce qui a un impact significatif sur la réussite du projet. Une analyse minutieuse est nécessaire pour éviter d'obtenir des résultats confus. Trois procédures de prétraitement des données sont exécutées pour former plus efficacement le modèle ANN:

1. résoudre le problème des données manquantes,
2. normaliser les données.

Au cours de cette étape, nous avons utilisé une mise à l'échelle décimale et une normalisation des données pour les ramener à une échelle uniforme. Les échelles d'entrée sont comprises entre $(-1; +1)$, ce qui améliore considérablement la vitesse d'apprentissage car ces valeurs se situent dans la région de la fonction sigmoïde (Rahali et al, 2018).

Un neurone contient essentiellement trois composantes principales avec la connaissance, le poids, le biais et la fonction d'activation. Un neurone typique peut être vu à la figure 5 (Thomas et Gupta, 2015). Il est connu que le biais du taux d'erreur estimé diminue en fonction de l'augmentation du nombre de formations et de tests.

Le perceptron multicouche (MLP) est la base neuronale du modèle qualifié par des algorithmes de propagation opposée ; elles sont simples, robustes et très puissantes dans l'identification du modèle et la classification (Derras, 2011). Chaque neurone situé dans l'entrée est connecté aux neurones de la couche cachée ; il n'y a pas de lien entre les unités de la même couche.

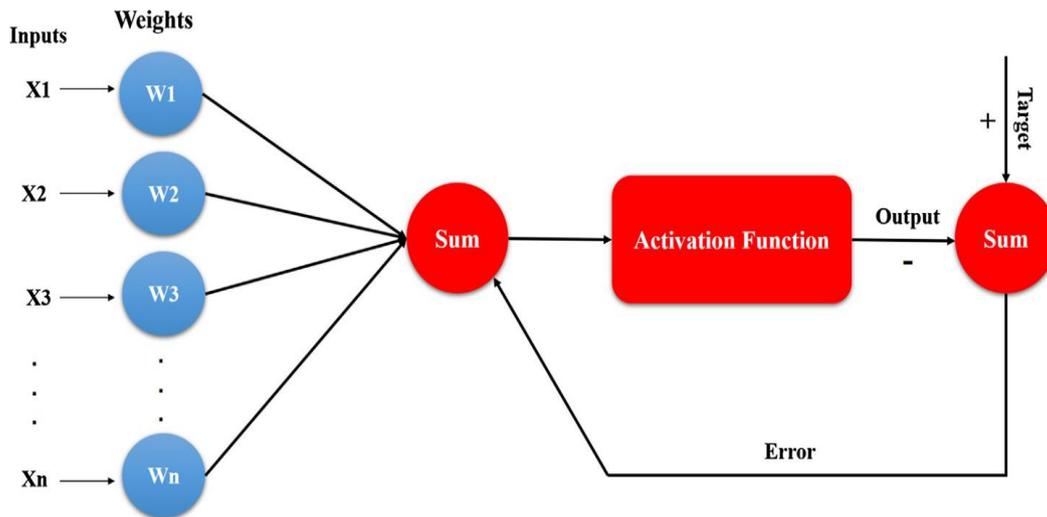


Figure V. 4 Schéma fonctionnel d'un réseau neuronal artificiel perceptron multicouche. (Parastoo et al, 2019)

Les connexions entre les différents neurones des différentes couches sont réparties de manière à ce que la sortie d'un neurone soit l'une des entrées de tous les neurones de la couche suivante et que toutes les entrées soient les sorties de la couche précédente (Derras, 2011). Le nombre de neurones dans chaque couche peut varier en fonction du cas de problème, c'est-à-dire que dans cette étude, il y a deux neurones dans la couche d'entrée.

La fonction sum est une fonction qui calcule l'effet des entrées et des poids. Cette fonction calcule l'entrée en clair qui arrive à une cellule (Ôztaş et al, 2006-Pala et al, 2007). La somme équilibrée des composantes d'entrée peut être calculée par Eq. (1):

$$(\text{net})_j = \sum_{i=1}^n w_{ij} * x_i + b \quad \text{Eq.V. 1}$$

Où $(\text{net})_j$ est la somme équilibrée du neurone J pour l'entrée reçue de la couche précédente, x_i est le neurone de sortie I de la couche précédente. b est une valeur fixe comme l'addition interne. La fonction Somme est envoyée à une fonction de transfert présélectionnée, appelée fonction d'activation via la cartographie de la fonction de transfert sigmoïde utilisée pour résoudre des problèmes (Uysal et Tanyildizi, 2012). La fonction considérée dans nos travaux est la fonction de la tangente hyperbolique exprimée par (Eq2)

$$(\text{output})_i = \left(e^{\alpha(\text{net})_j} - e^{-\alpha(\text{net})_j} \right) / e^{\alpha(\text{net})_j} + e^{-\alpha(\text{net})_j} \quad \text{Eq.V. 2}$$

Où: α est une constante utilisée pour contrôler la pente de la surface semi-linéaire et (sortie) correspond souvent au temps et à la température de revenu. Cette fonction transforme l'intervalle $(-\infty; +\infty)$ à $(-1; +1)$. Une fois que l'étape d'apprentissage du modèle a réussi, les performances du réseau sont vérifiées en présentant des fichiers de données de validation

indépendants de l'ANN. Ce processus s'appelle «validation». L'architecture sélectionnée était {2-2-1}.

Les valeurs de paramètres utilisées en recherche sont les suivantes:

- Nombre d'unités de la couche d'entrée = 2

Cela signifie qu'il y a 2 nœuds dans la couche d'entrée correspondant à deux paramètres à savoir: la température de revenu et le temps de désorption de l'hydrogène.

- nombre d'unités de couche de sortie = 1
- Taux de formation = 0,1
- Erreur après l'apprentissage = 0,01

Les performances du réseau de neurones dépendent des paramètres de l'architecture. Dans cette étude, l'analyse statistique implique l'erreur quadratique moyenne (MSE)(eq V.3), l'erreur absolue moyenne (MAE)(eq V.4) et le coefficient de corrélation (R) (Eq V.5). Elles ont été réalisées pour évaluer la performance du modèle. Le MSE indique une estimation plus précise. La MSE fournit des informations sur la performance à court terme qui mesure la variation des valeurs prédictives autour des données mesurées.

$$MSE = \sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - P_i)^2 / N} \quad \text{Eq.V. 3}$$

$$MAE = \left(\sum_{i=1}^N (|O_i - P_i|) \right) / N \quad \text{Eq.V. 4}$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i)(P_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i)^2 \sum_{i=1}^N (P_i)^2}} \quad \text{Eq.V.5}$$

Où O_i et P_i indiquent respectivement les valeurs réelles ou la cible et les valeurs prédites par RNA. Où N représente le nombre global de données

V.3. Résultats

L'architecture du réseau neuronal sélectionné pour la modélisation de la concentration en désorption de l'hydrogène est réalisée. La courbe de régression illustrant le test de prédiction ainsi que la validation et le test du modèle sont présentés à la Fig.V.5. La concentration a été atteinte en même temps par l'apprentissage et les résultats expérimentaux, comme le montre la Fig. V.5a. La concentration a été atteinte au même moment par des tests

et des résultats expérimentaux, comme le montre la figure V.5b. Le modèle après la formation et les tests sont validés par la suite, Fig V.5c. De plus, tous les résultats de la concentration obtenus à partir des données de test sont représentés sur la figure V.5c. Toutes les valeurs de formation, de validation et de test sont représentées sur la Fig. V.5d. Le coefficient de corrélation pour la formation, les tests et la validation, ainsi que pour l'unité, sont respectivement de 98,87% et 99,10% et 99,09% et 98,74%.

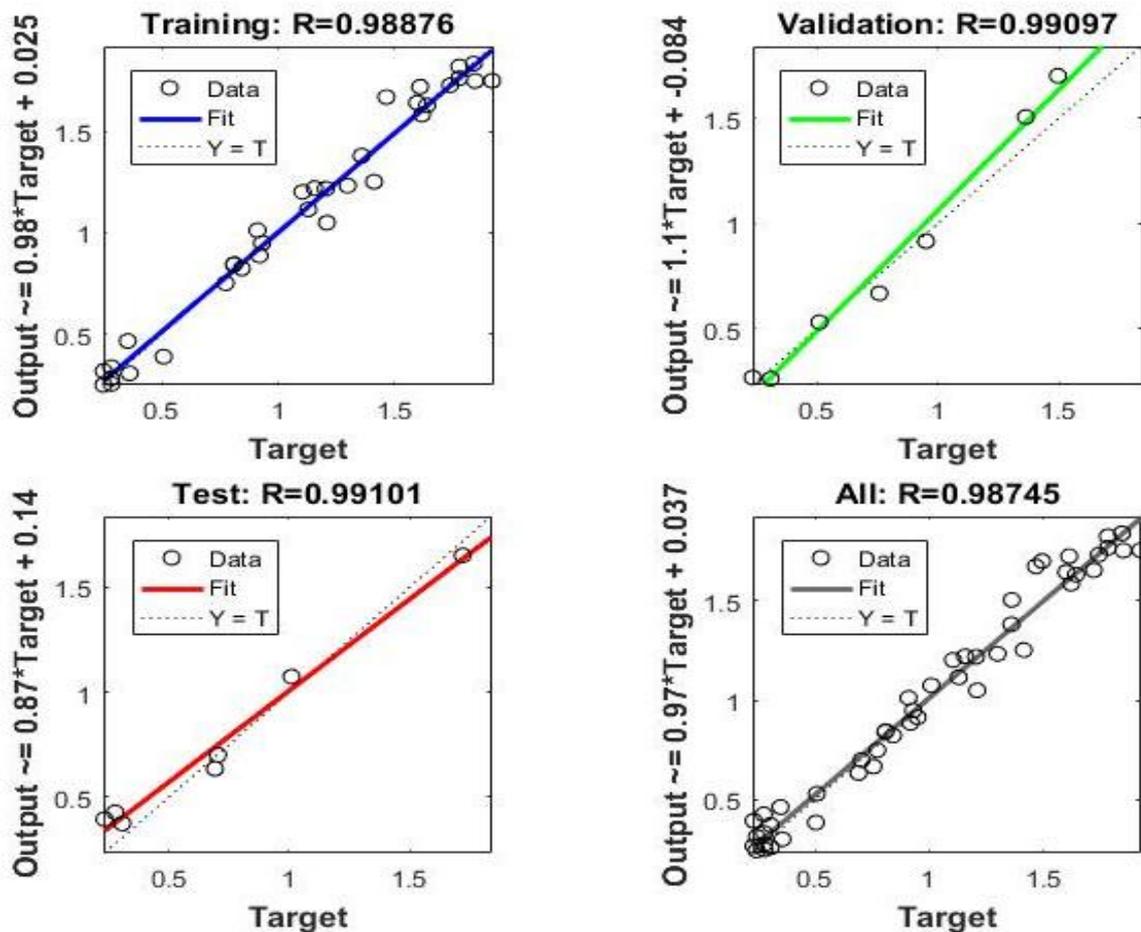


Figure V. 5 Données de formation (a), test (b), validation (c) et de l'ensemble des résultats (d)

De plus, les erreurs exprimées en pourcentages des taux de concentration obtenus à partir de la formation, des tests et de la validation dans le modèle RNA sont représentées à la Fig.6. Les statistiques de la concentration trouvées au moment de l'étape d'apprentissage, la validation et le test dans le modèle RNA, comme l'erreur quadratique moyenne (MSE), le coefficient de corrélation (R) et l'erreur absolue moyenne (MAE) sont également indiquées dans le tableau V.5. Pour le modèle RNA, nous avons opté pour la fonction Tanh-sigmoïde du fait que ce modèle centre le nuage expérimental sans données car la dispersion n'est pas bien

ordonnée et, comme mentionné plus haut, l'utilité de la fonction de transfert dans le réseau de neurones est d'introduire une non-linéarité dans le réseau. Les poids et les biais du réseau de neurones sont ajustés pour obtenir la somme nette (Net) J qui coïncide avec le domaine de la fonction de transfert tansigmoïde. Par conséquent, la concentration envisagée est générée par.

$$y = b_2 + IW * \tanh(b_1 + IW * x) \quad \text{Eq.V. 6}$$

D'où :

X : représente les inputs :

$$b_1 = \begin{pmatrix} 0.4801 \\ 9.8989 \end{pmatrix} \quad \text{Eq.V.7}$$

$$b_2 = 4.0356 \quad \text{Eq.V.8}$$

$$IW = \quad \text{Eq.V.9}$$

$$\begin{matrix} 0.3509 & 1.6517 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} 8.5004 & -0.4434 \end{matrix}$$

$$LW = \quad \text{Eq.V.10}$$

$$\begin{matrix} -0.9151 & -4.1368 \end{matrix}$$

Tableau V. 5 Valeurs Statistiques du RNA du modèle

	Concentration		
	Apprentissage	Validation	Test
Echantillons	70	15	15
R	0.9887	0.9909	0.9910
MAE	0.0686	0.0721	0.0916
MSE	0.0071	0.0102	0.0112
Performance	0.0071	0.0102	0.0112

En ce qui concerne les performances, nous avons choisi le meilleur, cela signifie que les performances idéales du modèle sont égales à 10^{-2} car nous voyons des données expérimentales pour lesquelles il est inutile d'affirmer qu'un degré de précision élevé est nécessaire pour affiner davantage, comme le montre la figure V.6.

En ce qui concerne l'histogramme d'erreur, l'erreur représente la différence entre la concentration calculée avec le modèle et la concentration observée, obtenue expérimentalement, comme indiqué à la figure V.6

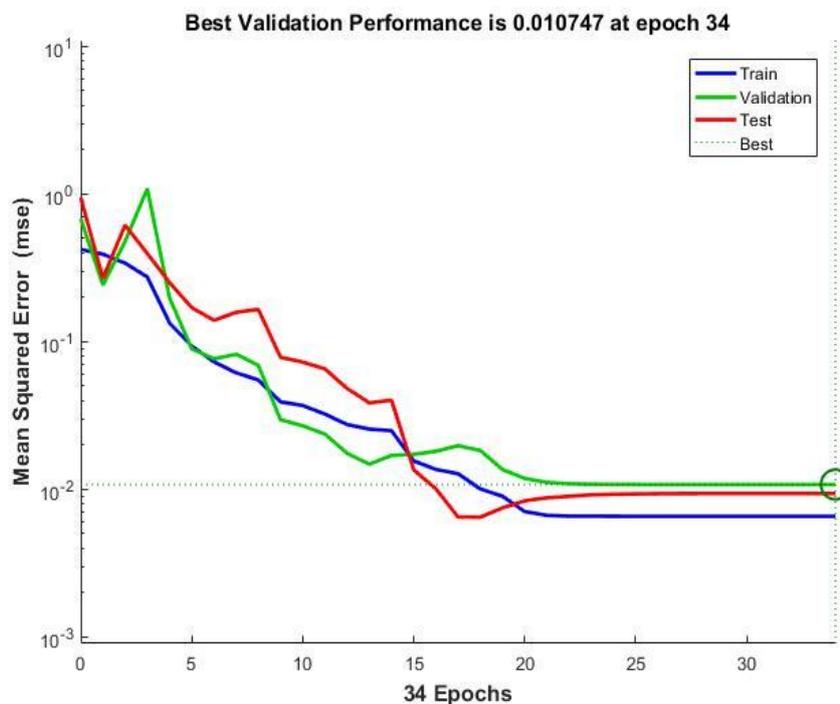


Figure V. 6 Validation de la performance du modèle

Donc le zéro est le cas parfait mais le parfait n'existe pas. Nous avons un intervalle d'erreurs compris entre 0,16 et 0,19 pour toutes les valeurs d'entrée, ainsi que pour les valeurs utilisées pour la formation. Ces valeurs testent les données ayant un intervalle d'erreur compris entre 0.064 et 0.066. Cet intervalle est très important si on le compare avec les autres valeurs, il est relativement bon pour le modèle que nous avons choisi. Notre modèle est donc considéré comme fiable.

En ce qui concerne l'histogramme d'erreur, l'erreur représente la différence entre la concentration calculée avec le modèle et la concentration observée, obtenue expérimentalement, comme indiqué à la figure V.7.

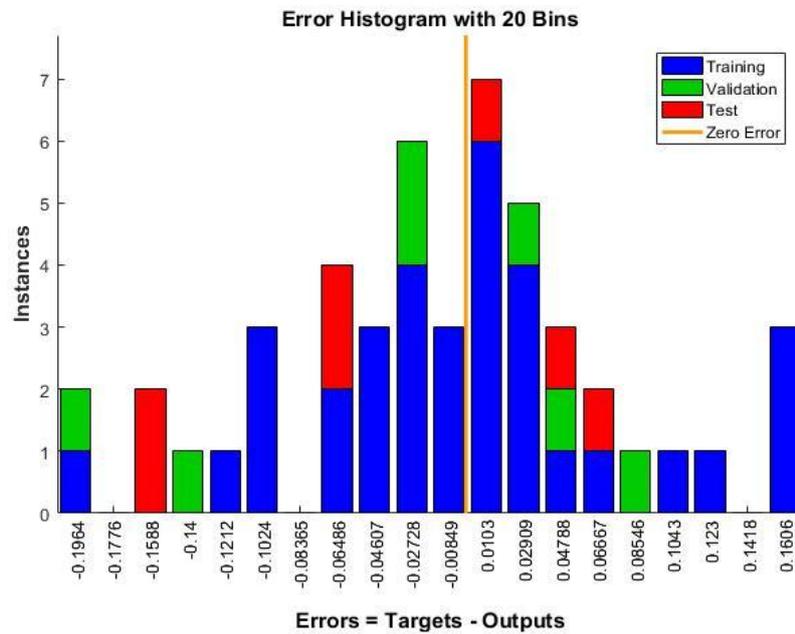


Figure V. 7 Les résultats Instances en fonction des Erreurs entre les cibles et les sorties

Donc le zéro est le cas parfait ; le parfait n'existant pas, nous avons un intervalle d'erreurs compris entre 0,16 et 0,19 pour toutes les valeurs d'entrée, ainsi que pour les valeurs utilisées pour la formation, qui testent les données ayant une erreur entre 0,064 et 0,066. Cet intervalle est très important si on le compare avec les autres valeurs, il est relativement bon pour le modèle que nous avons choisi. Notre modèle est donc considéré comme fiable.

V.4. Discussion

En analysant les résultats, nous pouvons constater que les coefficients statistiques de corrélation (R), l'erreur moyenne absolue (MAE), l'erreur moyenne quadratique (MSE) et les performances de formation dans le modèle ANN étaient respectivement de 98,87%, 0,686, 0,0071 et 0,0071.

Les valeurs obtenues dans la phase de test et celles trouvées dans la phase de validation sont respectivement : 99,10%, 0,0916, 0,0112, 0,0112, et 99,09%, 0,0721, 0,0102, 0,0102. Les erreurs pour les valeurs utilisées pour la formation, les tests et les étapes de validation sont - 0,19 et 0,16 pour toutes les valeurs d'entrée. En outre, les variations en

pourcentages d'erreur de désorption du temps d'hydrogène obtenues à partir des tests de formation et de la validation dans le modèle ANN sont données dans la fig V.7. De plus, les valeurs utilisées pour l'apprentissage, qui testent les données ayant une erreur comprise entre -0,064 et 0,066 ; sont très importantes par rapport aux autres valeurs, comme le montre la figure V.7 Dans notre modèle, nous avons utilisé deux paramètres le temps de désorption de l'hydrogène et la température de revenu comme entrées. Le modèle donne un coefficient de corrélation plus élevé (R) avec un plus faible MAE et une MSE car le but recherché est de réduire l'erreur. Ceci dit, le modèle donne de bons résultats dans l'ensemble de la validation et dans l'ensemble du test. L'augmentation de la température de revenu qui appartient aux intervalles 650°C et 700°C donne une bonne concentration en aspect mécanique cible. La concentration diminue un peu d'hydrogène au bout des 50 premières heures pour limiter l'activité néfaste de l'hydrogène dans l'acier.

V.5. Conclusion

Dans ce chapitre, dans un premier temps l'étude comparative faite entre l'utilisation d'un modèle statistique à régression non linéaire et un modèle de prédiction réalisé avec un réseau de neurones artificiels, le coefficient de corrélation nous a permis de distinguer les deux méthodes : la première a un coefficient de corrélation égal à 84% et la seconde à 98%. Il est établi que plus le coefficient de corrélation approche les 100%, plus le modèle, est considéré comme fiable et ajusté.

Afin de disposer d'un riche ensemble de données d'apprentissage, plusieurs expériences ont été effectuées à différentes températures de revenus (500, 550, 600, 650 et 700°C). Les temps de maintien de 4 53871 à 554 3761 heures sont des données obtenues expérimentalement. Ensuite, dans le cas de l'évaluation théorique de la concentration en hydrogène de 42CrMo4 (AISI4041), 47 données indépendantes sont obtenues à partir d'expériences réalisées au laboratoire, un perceptron RNA à plusieurs couches a été utilisé pour la prédiction du meilleur modèle qui définit l'intervalle de température optimale de revenu. Toutes les données sont divisées en ensembles de données: composés à 70% d'échantillons aléatoires de la base de données complètes, du sous-ensemble de validation, composé de 15% de l'ensemble de données complètes et de 15% de l'ensemble de données complètes sont utilisés pour estimer les performances du modèle.

Le réseau de neurones artificiels (RNA) a été utilisé pour prédire la température optimale de revenu et l'intervalle obtenu est compris entre 650 et 700°C, afin d'obtenir une

faible concentration de l'ordre de 0,264 ppm après 554,3761 heures à la température ambiante. La concentration en hydrogène a diminué de 0,692 ppm à 0,246 ppm alors que la concentration initiale était de 1,84 ppm. Cela signifie que cette valeur représente l'hydrogène diffusible qui se dégage ou qui s'échappe rapidement.

En nous référant à la littérature, nous savons que l'hydrogène se déplace à travers les dislocations. Les températures élevées de revenu tendent à détendre la microstructure et par conséquent à réduire la densité des dislocations et à augmenter la taille des plaques de martensite. La microstructure consiste en une distribution uniforme de carbures, ce qui permet un meilleur stockage de l'atome d'hydrogène considéré comme de l'hydrogène résiduel.

Les valeurs obtenues par l'apprentissage, le test et la validation pour les réseaux de neurones artificiels sont très proches des données expérimentales. Le modèle donne de bons résultats dans l'ensemble du test et dans l'ensemble de la validation avec un coefficient de corrélation (R) assez important ; les valeurs d'erreur MAE et MSE sont les moindres. Les valeurs statistiques calculées pour comparer les données expérimentales avec le modèle des réseaux de neurones artificiels concordaient parfaitement avec le modèle construit avec les réseaux de neurones artificiels.

En conséquence, la concentration en hydrogène peut être prédite par la méthode des réseaux de neurones sans utiliser de méthode expérimentale ou sans expérience préalable pour pouvoir la définir.

Abstract of Artificial Neuron Network

The purpose of this work is to study the susceptibility of steel 42CrMo4 (AISI4041) to hydrogen. This steel is a martensitic, that is widely used especially in the hydrogen storage industry, this one is tempered at different temperatures (500, 550, 600, 650 and 700°C), the application of artificial neural networks is proposed to predict the optimum tempering temperature to have a minimal quantity of hydrogen inside a metal by analyzing the hydrogen concentration parameter that escapes through the desorption phenomenon through time at room temperature. The mathematical model proposed by the neural network method has proved this and this has been validated once more by comparing it with a global statistical study following a coupling between the variables "time / concentration", "Tempering Temperature / concentration" carried out to test the reliability of the observations for the estimation of concentration using a multiple linear regression. In addition, the data used in the

model were taken from real experimental data and are arranged in a format of two input parameters: time and tempering temperature and output parameter is hydrogen concentration.

The model was arbitrated using Mean Absolute Error (MAE) and average quadratic error (MSE) and correlation coefficient and model performance values found as 0.0686 and 0.0071,98.87%,0.0071 for the training part and 0.0916 and 0.0112,99.10%,0.0112 for the test

References bibliographique

Chuang J.H., Tsay L.W., Chen, C., 1998, Crack growth behaviour of heat-treated steel in air and gaseous hydrogen”, *International Journal of Fatigue* 20-7, 531-536. 4140

Öztaş A., Pala M., Özbay E., Kanca N.C. ağlar M., Bhatti A., 2006. constructed a model with two hidden layers for predicting the compressive strength and slump of high strength concrete using neural network, *Construction and Building Materials* 20 (9) 769–775 <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2005.01.054>.

Pala M., Özbay E., Öztaş A., Yuce M.I., 2007 Developed a model for predicting long-term effects of fly ash and silica fume on compressive strength of concrete by using neural networks" *Construction and Building Materials* 21 (2) 384–394 <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2005.08.009>.

Parastoo Vahdati Yekta, Farzad Jaafari Honar, Mohammad Naghiyan Fesharaki, 2019, Modelling of hysteresis loop and magnetic behaviour of Fe-48Ni alloys using artificial neural network coupled with genetic algorithm, Computational Materials Science 159 (2019) 349–356 <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.025>.

Rahali B., Aissa Mamounee SM., Trouzine H., 2018, Using Artificial Neural Networks Approach to Estimate Compressive Strength for Rubberized Concrete, Periodica Polytechnica Civil Engineering <https://doi.org/10.3311/PPci.11928>.

Thomas R. L. S., Gangloff R. P. et Scully J. R., (2002) Metall. Trans. A, 33 pp1991-2004

Uysal M., Tanyildizi H., 2012, Estimation of compressive strength of self-compacting concrete containing polypropylene fiber and mineral additives exposed to high temperature using artificial neural network. Construction and Building Materials, Vol.27, N°1, 404-414 <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2011.07.028>.

CONCLUSION GENERALE

Dans le cadre de la démarche scientifique adoptée pour réaliser ce projet, les résultats mettent en évidence les paramètres physiques tel que le temps accorder à la désorption de l'hydrogène à partir du métal qui représente un gain économique important dans le domaines de l'industrie et chimiques tel que le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans la matrice d'acier en présence de piège réversible la concentration à chaque position suivant la cinétique de désorption qu'il faut prendre en compte pour déjouer l'effet néfaste et fragilisant de l'hydrogène sur les aciers.

La FPH réduit considérablement leurs durées de vie. En outre les méthodes stochastiques aux quelle on a fait appel tout au long de cette étude appliqué à des machines puissante via des langages de programmation appropriés, certes que ses méthodes sont gourmandes en temps de calcul mais les résultats fourni sont plus que satisfaisant.

Cela a permis de gérer les désagréments des modèles mathématiques et leurs incertitudes bien évidemment comme tout projet d recherche digne de ce nom les résultats ont été validé grâce aux études comparatives ce qu'on devrait proposé en amont des études futures.

La Fragilisation par l'hydrogène (FPH) est un phénomène complexe de dégradation des matériaux métalliques dont les mécanismes ont fait et font encore l'objet de nombreux débats entre les aciéristes. Les mécanismes sont dépendants de paramètres plus ou moins contrôlables tels que la nature du matériau (composition chimique, traitement thermique),

La première partie du travail illustre une analyse probabiliste du temps de désorption de l'hydrogène à l'aide de la méthode de Simulation de Monte Carlo ; La concentration de l'hydrogène " C_{∞} ", le coefficient de diffusion effectif " D_e " ont été considéré comme champ aléatoire. La réponse probabiliste est la striction " Z " cette dernière repose sur la seconde loi de diffusion dite la loi de Fick. Une étude paramétrique a été entreprise pour enquêter sur l'influence du COV (coefficient de variation) des paramètres d'entrée sur l'estimation de la probabilité de défaillance, Les champs aléatoires des paramètres (D_e et C_{∞}) ont été discrétisés en un nombre fini de variables aléatoires en utilisant la discrétisation de Karhunen-Loeve. Le paramètre d'entrée qui a le plus d'impact est le coefficient de diffusion (D_e). En fait, dans une section réduite où les distances d'autocorrélation sont beaucoup plus petites, on note une hétérogénéité du matériau qui a entraîné la variabilité du coefficient de diffusion.

Une optimisation du temps calcul a été réalisée en adaptant chaque intervalle de temps à un nombre précis de simulation.

L'influence des paramètres régissant la désorption de l'hydrogène et leur dispersion lors de l'optimisation du temps de calcul a été étudiée afin de déterminer la variabilité spatiale de ces paramètres sur le type de matériau C-Mn. Leurs effets sur le dégagement d'hydrogène afin d'obtenir une durée de stockage optimale ont été étudiés. De plus, une étude paramétrique a été entreprise pour étudier l'effet des paramètres d'entrée et les aspects statistiques des variables aléatoires sur les fonctions de distribution de probabilité de la réponse du système.

Il convient de noter que la durée de stockage optimale déduite pour la désorption de l'hydrogène par l'approche déterministe figurant dans la littérature est supérieure à environ 98 heures pour atteindre la striction requise. Pour l'approche probabiliste et en particulier pour une probabilité de défaillance égale à 10^{-3} , ce qui signifie une grande précision et la striction requise qui doit être supérieur ou égale à 30% est atteinte pour la durée de stockage de 62 heures. En conséquence, nous obtenons un gain égal à 36 heures de temps de stockage et cette durée garantit l'obtention de la ductilité requise pour l'utilisation de ce matériau.

L'étude expérimentale qui s'est consacré au pré-chargement thermique à haute pression de l'hydrogène de l'acier 42CrMo4 a permis de déterminer quels sont les propriétés mécaniques directement affecté par l'hydrogène aussi important en terme de concentration minimale d'hydrogène quel est le meilleur traitement thermique qui le permet.

La seconde partie exhibe l'Analyse de l'effet de la température de revenu sur le temps et la concentration de désorption de l'hydrogène par les réseaux de neurones artificiels qu'est une sous branche de l'intelligence artificielle ;l'application de réseaux de neurones artificiels est proposée pour prédire la température optimale de revenu afin de contenir une quantité minimale d'hydrogène dans un métal en analysant le paramètre de concentration en hydrogène qui s'échappe du phénomène de désorption à travers le temps à la température ambiante selon le modèle mathématique proposé par la méthode du réseau neuronal l'a prouvé et cela a été validé une fois de plus en le comparant à une étude statistique globale résultant d'un couplage entre les variables «temps / concentration», «Température de revenu / concentration» réalisée pour tester la fiabilité des observations pour l'estimation de la concentration en utilisant une régression linéaire multiple et le résultat trouvé n'a fait que confirmé les résultats de l'étude expérimentale sur la température de revenu exacte qui de l'ordre de 650 et 700 °C.

ANNEXES

Annexe A

Programme MATLAB Correspond aux chapitres 3

```
clear all
clc
tic
format long
global xsis lx ly NumKL ax ay Pf_sub Ns_Sim Ct
=====
% Input data
=====
Ns_Sim = 200 ; % Number of realizations to be evaluated at each
Level
t = 4; %t=100 heures
=====
%sigma1 = 0.03629 ;
%TheMean1 = 0.55672; % Cinf
%TheCOV1 = sigma1/TheMean1; %cov de référence
%TheCOV1 = TheCOV1+(TheCOV1/2);
=====
RFinput.OrderExp = 100
RFinput.CorrLength = (2 , 2);
xmin = 0 ;
xmax = 400 ;
ymin = 0 ;
ymax = 11;

Example_RF_2D_De;
Example_RF_2D_Cinf; %Cs=Co
%Example_RF_2D_c;
%Example_RF_2D_Ccr;

% Vmax = 0.99

%Example_RF_2D_k;
%Example_RF_2D_Nu;
Simulation_Method=2; % Méthode de Simulation MCS ou Subset
Ns_subset= Ns_Sim;
Pf_sub = 0.1; % Imposed failure probability for each Level
au = 0;
bu = 1;
r = 0;
%t = 1;
=====
% calculation of coordinates of each element in each realization
% X = (0.2 0.6 1 1.4 1.8 2.2 2.6 3 3.4 3.8 4.2 4.6 5 5.4 5.8);
% Y = (0.2 0.6 1 1.4 1.8 2.2 2.6 3 3.4 3.8);
X = (100 200 300 400);
Y = (0.5 1.5 2.5 3.5 4.5 5.5 6.5 7.5 8.5 9.5 10.5 );
Y=Y';
% %=====
```

```

NumKL=RFinput.OrderExp;
%----- Programme Subset Simulation -----
Level = 1;
%xisis_previous_Level = randn(Ns_Sim,NumKL);
jj1 = 1;
ii1 = 1;
xisis_previous_Level= randn(Ns_subset ,NumKL);

xisis_total = xsis_previous_Level;

for realiz = 1:Ns_Sim
    Level_Number = Level
    realiz_Number = realiz
    xsis = xsis_previous_Level(realiz,:);
    for yyy = 1:size(Y,1)
        for xxx = 1:size(X,2)
            x = X(1,xxx);
            y = Y(yyy,1);
            RF1_Var1_De (yyy,xxx) = EvalRandomField(RF1,(x y),xisis);
            RF2_Var2_Cinf (yyy,xxx) = EvalRandomField(RF2,(x y),xisis);
            %RF3_Var3_c (yyy,xxx) = EvalRandomField(RF3,(x y),xisis);
            %RF4_Var4_Ccr(yyy,xxx) = EvalRandomField(RF4,(x y),xisis);
        end
    end
    Calcul_g_Duracrete_Li;
    output(realiz,1) = out1;
end
toc
output_Level_1 = output;
xisis_total = xsis_previous_Level;
output_total = output;
Z
Pf=mean (output)
RFinput =

```

OrderExp: 100

* Discretizing the random field ... Computing error variance ...

10% / 20% / 30% / 40% / 50% / 60% / 70% / 80% / 90% / 100% /

Domain of discretization : (0, 0) x (4e+002, 11)

Discretization scheme : KL

Order of expansion : 100

Error Variance :

Min = 0.7331

Mean = 0.7999

Max = 0.9785

* Discretizing the random field ...

Level_Number =

1

realiz_Number =

1

Level_Number =

1

realiz_Number =

2

Level_Number =

1

Annexe B

Programme MATLAB Correspond aux chapitres 4

```
% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network
```

```
% Script generated by Neural Fitting app
```

```
% Created 20-Feb-2020 09:10:04
```

```
%
```

```
% This script assumes these variables are defined:
```

```
%
```

```
% InputCC - input data.
```

```
% OutputCC - target data.
```

```
x = InputCC';
```

```
t = OutputCC';
```

```
% Choose a Training Function
```

```
% For a list of all training functions type: help nntrain
```

```
% 'trainlm' is usually fastest.
```

```
% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.
```

```
% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.
```

```
trainFcn = 'trainlm'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.
```

```
% Create a Fitting Network
```

```
hiddenLayerSize = 2;
```

```
net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);
```

```
% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
```

```
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
```

```

net.divideParam.valRatio = 15/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;

% Train the Network
[net,tr] = train(net,x,t);

% Test the Network
y = net(x);
e = gsubtract(t,y);
performance = perform(net,t,y)

% View the Network
view(net)

% Plots
% Uncomment these lines to enable various plots.
%figure, plotperform(tr)
%figure, plottrainstate(tr)
%figure, ploterrhist(e)
%figure, plotregression(t,y)
%figure, plotfit(net,x,t)

function [Y,Xf,Af] = myNeuralNetworkFunction(X,~,~)
%MYNEURALNETWORKFUNCTION neural network simulation function.
%
% Generated by Neural Network Toolbox function genFunction, 20-Feb-2020 09:09:08.
%
% [Y] = myNeuralNetworkFunction(X,~,~) takes these arguments:
%
```

```

% X = 1xTS cell, 1 inputs over TS timesteps
% Each X{1,ts} = Qx2 matrix, input #1 at timestep ts.
%
% and returns:
% Y = 1xTS cell of 1 outputs over TS timesteps.
% Each Y{1,ts} = Qx1 matrix, output #1 at timestep ts.
%
% where Q is number of samples (or series) and TS is the number of timesteps.

%#ok<*RPMT0>

% ===== NEURAL NETWORK CONSTANTS =====

% Input 1
x1_step1.xoffset = [0.001;500];
x1_step1.gain = [0.00287352606072623;0.01];
x1_step1.ymin = -1;

% Layer 1
b1 = [-0.50734015729997672;11.810921988597411];
IW1_1 = [-0.31387629989410343 -1.3558539534810805;10.454250605355952 -
0.50847477840819111];

% Layer 2
b2 = 3.454538311971513;
LW2_1 = [0.99003138923321943 -3.4980536811781331];

% Output 1
y1_step1.ymin = -1;
y1_step1.gain = 1.18354260339132;
y1_step1.xoffset = 0.233398;

```

```

% ===== SIMULATION =====

% Format Input Arguments
isCellX = iscell(X);
if ~isCellX, X = {X}; end;

% Dimensions
TS = size(X,2); % timesteps
if ~isempty(X)
    Q = size(X{1},1); % samples/series
else
    Q = 0;
end

% Allocate Outputs
Y = cell(1,TS);

% Time loop
for ts=1:TS

    % Input 1
    X{1,ts} = X{1,ts}';
    Xp1 = mapminmax_apply(X{1,ts},x1_step1);

    % Layer 1
    a1 = tansig_apply(repmat(b1,1,Q) + IW1_1*Xp1);

    % Layer 2
    a2 = repmat(b2,1,Q) + LW2_1*a1;

```

```

% Output 1
Y{1,ts} = mapminmax_reverse(a2,y1_step1);
Y{1,ts} = Y{1,ts}';
end

% Final Delay States
Xf = cell(1,0);
Af = cell(2,0);

% Format Output Arguments
if ~isCellX, Y = cell2mat(Y); end
end

% ===== MODULE FUNCTIONS =====

% Map Minimum and Maximum Input Processing Function
function y = mapminmax_apply(x,settings)
y = bsxfun(@minus,x,settings.xoffset);
y = bsxfun(@times,y,settings.gain);
y = bsxfun(@plus,y,settings.ymin);
end

% Sigmoid Symmetric Transfer Function
function a = tansig_apply(n,~)
a = 2 ./ (1 + exp(-2*n)) - 1;
end

% Map Minimum and Maximum Output Reverse-Processing Function
function x = mapminmax_reverse(y,settings)

```

```
x = bsxfun(@minus,y,settings.ymin);  
x = bsxfun(@rdivide,x,settings.gain);  
x = bsxfun(@plus,x,settings.xoffset);  
end
```