
Modeling of the interaction between corrosion diffusion and mechanical behavior of metallic alloys by FEM coupling

Présentation finale

Julien Heremans

Université de Liège, Faculté des Sciences Appliquées



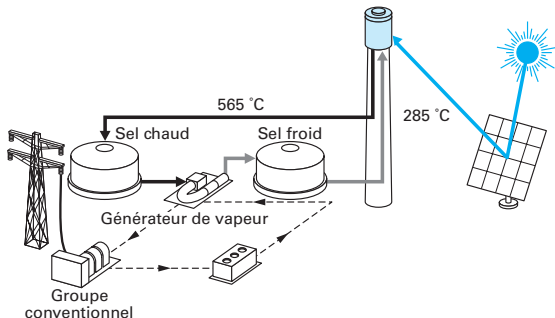
27 Juin 2019

Introduction

Applications

Pourquoi est-il important de prendre en compte la corrosion?

- Prédiction de la durée de vie plus **précise**
- Fluide caloporteur = Sels fondus (\uparrow potentiel corrosif)
- $\uparrow T^{\circ}\text{C} \rightarrow \uparrow$ rendement du cycle
- Meilleure utilisation des matériaux (\uparrow rentabilité installation)

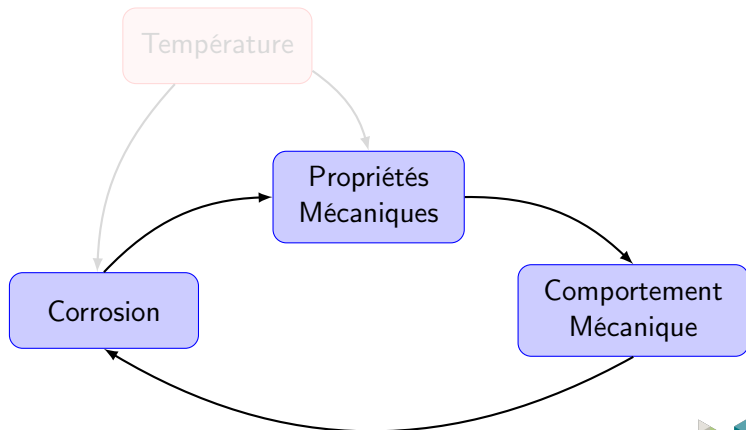


©Techniques de L'ingénieur 2019

Introduction

Position du problème

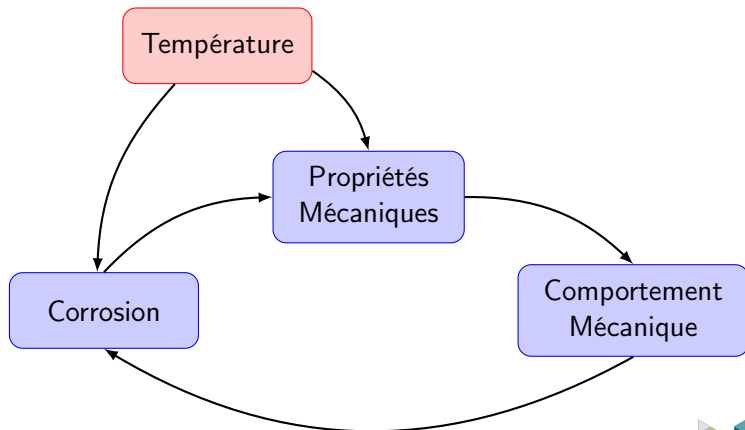
Modélisation de l'interaction entre la corrosion et le comportement mécanique d'un solide.



Introduction

Position du problème

Modélisation de l'interaction entre la corrosion et le comportement mécanique d'un solide.



Modèles Développés

4 Modèles Développés:

- Diffusion Naturelle 1D
- Diffusion Naturelle 2D
- Mécanique des Solides 2D
- Couplage 2D diffusion - Mécanique

Procédure:

- Développements mathématiques
- Développement numérique (Fortran 90 - Python)
- Vérification (\approx aspects math.)
- Validation (\approx aspects physiques)

Hypothèses et Équations

Modèle Diffusion

But: Déterminer distribution temporelle du taux de corrosion c (= concentration relative en oxygène)

$$c = \frac{[O_2]}{[O_2]_{cr.}}$$

Modèle basé sur une diffusion non-fickienne:

$$\nabla \cdot \left(\underbrace{D\nabla c}_{Fick} - \underbrace{DcM\nabla p}_{Non-Fick} \right) = \frac{\partial c}{\partial t}$$

Avec

- $p = \frac{1}{3} \text{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{3} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$
- M facteur de pression
- D diffusivité de l'oxygène

Hypothèses et Équations

Modèle Mécanique

- Équations d'équilibre (+ état plan de contrainte)
- Équation de compatibilité
- Élasticité Linéaire Isotrope (Loi de Hooke)
- Prise en compte corrosion → loi d'endommagement

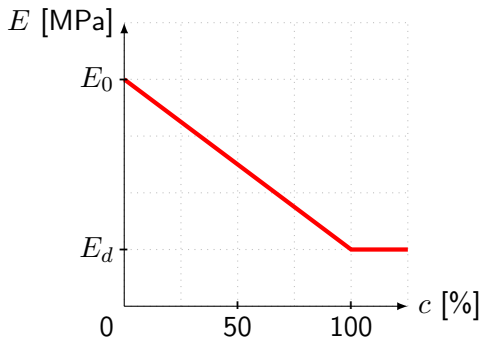


Figure: Loi d'endommagement pour E

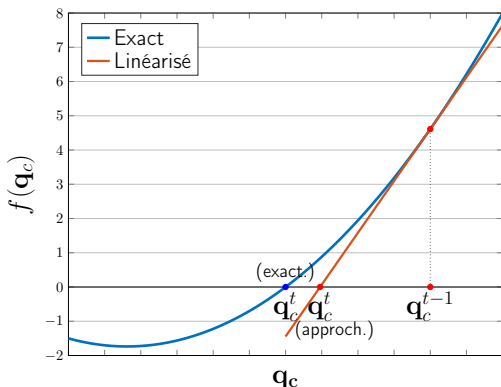
Système global couplé

- Discrétisation en éléments finis \rightarrow système non linéaire en \mathbf{q}_u et \mathbf{q}_c
- Système linéarisé en supposant $\mathbf{q}_c^t \approx \mathbf{q}_c^{t-1} \rightarrow$ système d'équation différentiel linéaire.
- Résolution par schéma implicite approché (ok si $\Delta t \approx 0$)
- Modèle FEM basé sur les déplacements ($\rightarrow \mathbf{u}$ et c sont les inconnues primaires)

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_{cc} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}_c \\ \dot{\mathbf{q}}_u \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{cc} & \mathbf{K}_{cu} \\ \mathbf{K}_{uc} & \mathbf{K}_{uu} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_c \\ \mathbf{q}_u \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{g}_c \\ \mathbf{g}_u \end{Bmatrix}$$

Système global couplé

- Discrétisation en éléments finis \rightarrow système non linéaire en \mathbf{q}_u et \mathbf{q}_c
- Système linéarisé en supposant $\mathbf{q}_c^t \approx \mathbf{q}_c^{t-1} \rightarrow$ système d'équation différentiel linéaire.
- Résolution par schéma implicite approché (ok si $\Delta t \approx 0$)



Influence de la corrosion sur la mécanique

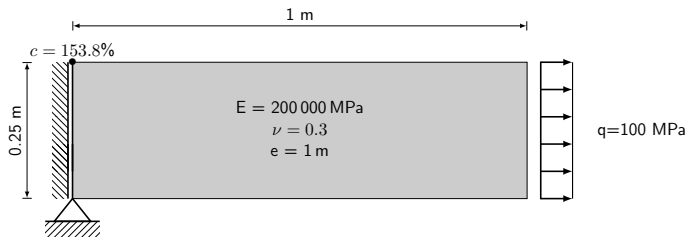


Figure: Description du Cas Test 1

Influence de la corrosion sur la mécanique

Figure: Déplacements x [m]

Figure: Corrosion c [%]

Influence de l'état de contrainte sur la diffusion

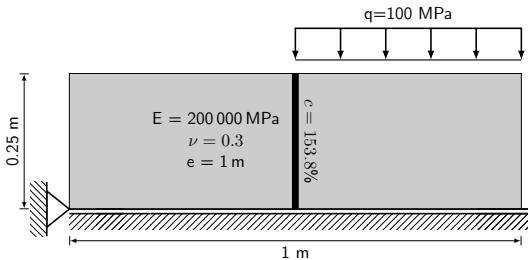


Figure: Description du Cas Test 2

Influence de l'état de contrainte sur la diffusion

Figure: Corrosion c [%]

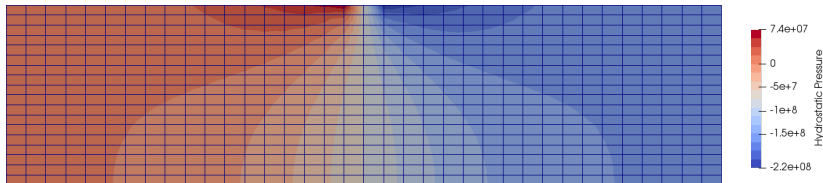


Figure: Pression Hydrostatique p [Pa]

Couplage complet

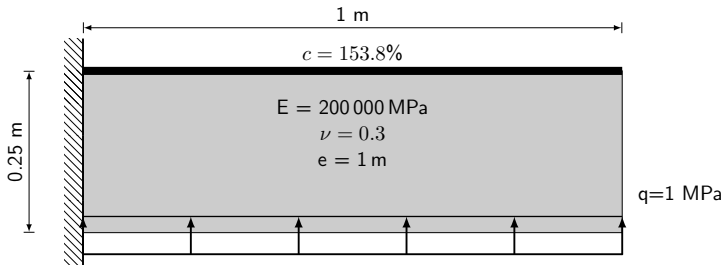


Figure: Description du Cas Test 3.

Couplage complet

Figure: Déplacements x [m]

Figure: Corrosion c [%]

Conclusions

Conclusions globales:

- Si gradient de pression $\uparrow\uparrow$ (resp. $\downarrow\downarrow$) \rightarrow corrosion accélérée (resp. décélérée).
- Corrosion \uparrow \rightarrow adoucissement \rightarrow redistribution de contraintes

Autres conclusions:

- Éléments Quad4 satisfaisants pour modéliser gradient de pression (peu de gain apporté par Quad9).
- Gradient de pression très sensible à des petites perturbations (\rightarrow divergence)
- Validation effectuée pour $M = 0$ a montré une bonne corrélation avec données exp.
- Divergence observée pour $M \uparrow\uparrow$ ($\rightarrow T \gg 0$).

Perspectives

Modèle requière des améliorations pour être utilisable sur les applications cibles

- Utilisation sur maillages non-structurés
 - Formulation mixte $u - p - c$?
 - Résolution du système exact (\rightarrow non-linéaire)
- Intégration d'un modèle thermique (+ couplage corr.-méca.)
- Extension au 3D
- Prise en compte de la plasticité du matériau
- Intégration du gonflement

Questions ?

Merci pour votre attention !



Hypothèses et Équations

Modèle Mécanique

Équations d'équilibre (+ état plan de contrainte):

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + b_x = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + b_y = 0 \end{cases}$$

Équation de compatibilité:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial u_i} \right)$$

Élasticité Linéaire Isotrope (Loi de Hooke):

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1 + \nu} \left(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1 - 2\nu} \varepsilon_{kk} \delta_{ij} \right)$$

Loi de dégradation

Utilisation d'une variable d'endommagement ϕ obligatoire pour éviter $E < 0$:

$$\phi = \min(c; 100)$$

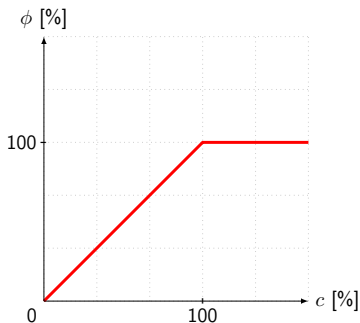


Figure: Définition de la variable d'endommagement ϕ

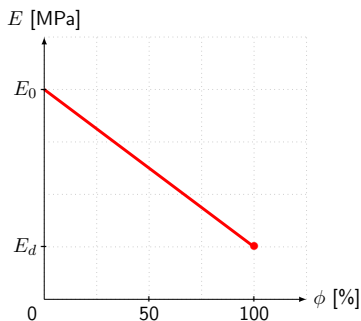


Figure: Loi d'endommagement illustrée pour le module de Young

Système global couplé

- Discrétisation en éléments finis \rightarrow système non linéaire en \mathbf{q}_u et \mathbf{q}_c
- Système linéarisé en supposant $\mathbf{q}_c^t \approx \mathbf{q}_c^{t-1} \rightarrow$ système d'équation différentiel linéaire.
- Résolution par schéma implicite approché (ok si $\Delta t \approx 0$)
- Modèle FEM basé sur les déplacements ($\rightarrow u$ et c sont les inconnues primaires)

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_{cc} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}_c \\ \dot{\mathbf{q}}_u \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{cc} & \mathbf{K}_{cu} \\ \mathbf{K}_{uc} & \mathbf{K}_{uu} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_c \\ \mathbf{q}_u \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{g}_c \\ \mathbf{g}_u \end{Bmatrix}$$

Système global couplé

- Discrétisation en éléments finis → système non linéaire en \mathbf{q}_u et \mathbf{q}_c
- Système linéarisé en supposant $\mathbf{q}_c^t \approx \mathbf{q}_c^{t-1}$ → système d'équation différentiel linéaire.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_{cc} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}_c \\ \dot{\mathbf{q}}_u \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{cc} & \mathbf{K}_{cu} \\ \mathbf{K}_{uc} & \mathbf{K}_{uu} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_c \\ \mathbf{q}_u \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{g}_c \\ \mathbf{g}_u \end{Bmatrix}$$

$$\mathbf{C}_{cc}^t = e \int_{\Omega} \mathbf{N}_c^T \mathbf{N}_c d\Omega$$

$$\mathbf{K}_{cc}^t = eD \int_{\Omega} \mathbf{B}_x^T \mathbf{B}_x + \mathbf{B}_y^T \mathbf{B}_y d\Omega$$

$$\mathbf{K}_{cu}^t = -eDM \int_{\Omega} \mathbf{B}_x^T \mathbf{N} \mathbf{q}_c^{t-1} \mathbf{m} \mathbf{D} \mathbf{L}_x + \mathbf{B}_y^T \mathbf{N} \mathbf{q}_c^{t-1} \mathbf{m} \mathbf{D} \mathbf{L}_y d\Omega$$

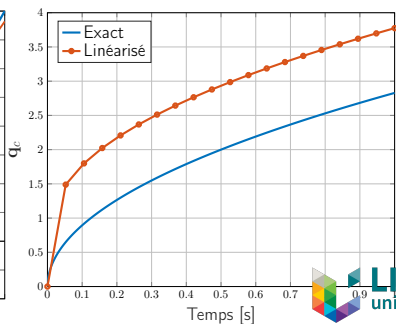
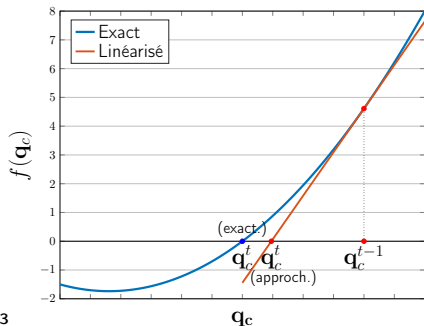
$$\mathbf{K}_{uc}^t = 0$$

$$\mathbf{K}_{uu}^t = e [1 - (1 - \alpha)] \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{N}_c \mathbf{q}_\phi^t \mathbf{D}_0 \mathbf{B} d\Omega$$

Système global couplé

- Discrétisation en éléments finis \rightarrow système non linéaire en \mathbf{q}_u et \mathbf{q}_c
- Système linéarisé en supposant $\mathbf{q}_c^t \approx \mathbf{q}_c^{t-1} \rightarrow$ système d'équation différentiel linéaire.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_{cc} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\mathbf{q}}_c \\ \dot{\mathbf{q}}_u \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{cc} & \mathbf{K}_{cu} \\ \mathbf{K}_{uc} & \mathbf{K}_{uu} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_c \\ \mathbf{q}_u \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{g}_c \\ \mathbf{g}_u \end{Bmatrix}$$



Cas Test 3

Figure: Pression Hydrostatique p [Pa]

Figure: Corrosion c [%]

Validation modèle 1D - diffusion naturelle

- Pas de résultats exp. disponibles pour le couplage.
- Études exp. pour corrosion statique-statique ($M = 0$) ne s'intéressent pas à D (\rightarrow incertitude sur sa valeur)
- Bonne corrélation, pour un bon choix de D .

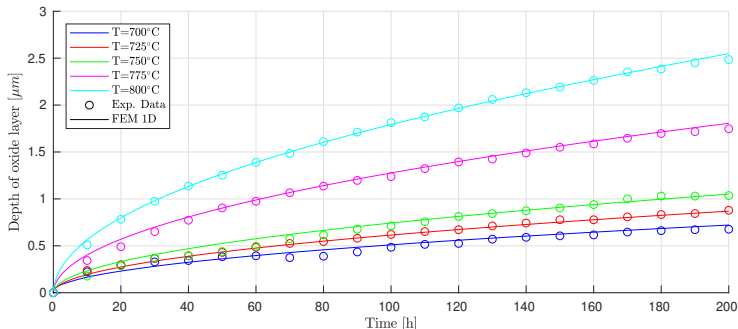


Figure: Résultats Expérimentaux vs. Numériques

Quad4 vs. Quad9

Figure: Quad4

Figure: Quad 9

Maillages non-structurés

Figure: Maillage structuré

Figure: Maillage non-structuré