

Sujet de thèse (2022-2025)

# Simulations thermomécaniques pour des matériaux sous contraintes extrêmes

L'hydrogène est utilisé dans de nombreux procédés comme vecteur d'énergie (stockage dans des bouteilles ou citernes) ou comme source d'énergie (confinement dans les réacteurs). Que ce soit pour le stockage, le transport ou le confinement, il est en contact avec des parois métalliques. Pour garantir la tenue en service de ces matériaux, il est essentiel de comprendre comment l'hydrogène y diffuse, s'y piège (par exemple dans les lacunes et/ou les dislocations), les fragilise et les dégrade. Or le transport de l'hydrogène dans les matériaux dépend des champs thermomécaniques ; il est donc essentiel d'avoir une cartographie pertinente de ces grandeurs (température, pression hydrostatique, déformation plastique et dilatation thermique) dans les matériaux étudiés [1,2]. Le travail de thèse vise particulièrement à investir :

1. L'impact du changement des propriétés matériaux par la présence d'hydrogène sur les valeurs des champs thermomécaniques et le transport d'hydrogène.
2. La modélisation de l'évolution de la densité de pièges avec la température (restauration, recristallisation) et avec la plasticité.

Les modèles génériques développés, ou issues de la littérature, devront pouvoir être appliqués pour l'étude des comportements dans du tungstène, du fer, de l'acier 316L et de l'Eurofer. La résolution numérique des champs thermomécanique sera effectuée à l'aide du logiciel Éléments Finis FEniCS [4,5]. Le transport de l'hydrogène sera couplé avec le code FESTIM [6]. Les données de base nécessaires seront extraites de la littérature et/ou issues de données expérimentales obtenues au LSPM ou par nos partenaires.

Le travail attendu est le suivant :

- **Bibliographie (4 mois)** : Synthèse des données thermomécaniques des matériaux d'intérêt, des travaux montrant les dépendances avec la présence de l'hydrogène et des évolutions des densité des pièges (dislocations, lacunes) avec la plasticité. Analyse des modèles et des données sur la mobilité des pièges (modèles de Fick adapté ou non, nature des dépendances avec la température).
- **Support à l'analyse des résultats expérimentaux du LSPM (4 mois)** : Particulièrement les données TDS (Thermal Desorption Spectroscopy) fonction de la déformation plastique, remonter à une loi liant plasticité et piégeage.
- **Prise en main de FEniCS pour les calculs de diffusion thermique et mécanique (8 mois)**
- **Modèle d'évolution des pièges (6 mois)**, avec un focus particulier sur l'effet de la restauration/recristallisation sur la cinétique de l'annihilation des pièges. Doit prendre en compte la mobilité (diffusion fickienne ou non) des pièges. Reproduction d'expériences de la littérature sur le transport de pièges par dislocation.
- **Synthèse sur la variabilité des valeurs des champs thermomécanique en fonction de la teneur en hydrogène (4 mois)**
- **Applications au cas d'étude multimatériaux pour la fusion (5 mois)** pour estimer l'importance ou non des champs mécaniques sur l'inventaire et la perméation d'hydrogène.
- **Rédaction (5 mois)**

[1] [Benannoune, et al. IJHE 43 \(2018\) 18:9083](#)

[2] [Benannoune et al. Phys. Scr. T171 \(2020\) 01401](#)

[3] [Panayotis et al. Fus. E. Design 125 \(2017\) 256](#)

[4] [Alnaes et al. A Num. Soft. 3 \(2015\) 100:9](#)

[5] [Bleyer Zenodo \(2020\)](#)

[6] [Delaporte-Mathurin et al. NME 21 \(2019\) 100709](#)

## Requis :

- Expérience en simulation numérique multi-physique et maîtrise d'un code éléments finis
- Bon niveau de programmation en Python
- Compétences rédactionnelles (français et anglais) et aisance à l'oral
- Expérience d'utilisation de FEniCS appréciée

## Encadrement :

- Yann Charles (directeur) : [yann.charles@univ-paris13.fr](mailto:yann.charles@univ-paris13.fr)
- Fabien Cazes et Jonathan Mougnot : [fabien.cazes@univ-paris13.fr](mailto:fabien.cazes@univ-paris13.fr) | [jonathan.mougnot@lspm.cnrs.fr](mailto:jonathan.mougnot@lspm.cnrs.fr)