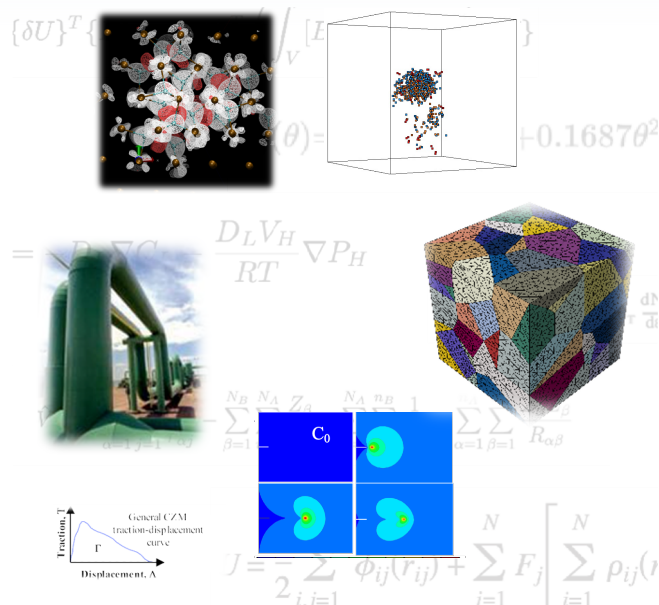


Modélisation/Simulation des Interactions Hydrogène-Matériau et de la Fragilisation Par l'Hydrogène (FPH) : de l'échelle atomique à la structure

2 Juin 2022

LSPM-CNRS, Villetaneuse



Dans le cadre des journées thématiques initiées par la commission CSC-FC-FPH (Ch. Blanc / C. Bosch), jusqu'à présent consacrées à des aspects expérimentaux (2014, 2016, 2019 et 2021), cette nouvelle rencontre porte sur la modélisation et la simulation numérique des interactions hydrogène-matériau et de la fragilisation par l'hydrogène (FPH). Les exposés présenteront, de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique, les principales approches de modélisation, discrètes ou continues, et leur domaine d'application. Dans le même esprit que les rencontres précédentes, l'objectif est de dresser un large panorama des pratiques et méthodologies, de l'intérêt et des limitations des différentes approches, ainsi que des précautions de mise en œuvre.

Le format choisi pour ces rencontres est le suivant : exposé de 30 min, suivi de 30 à 45 min de discussion.

Inscriptions

L'inscription à cette journée est gratuite mais obligatoire. Le nombre de places est limité. L'inscription se fait par mail à :

yann.charles@univ-paris13.fr

Les frais de déplacement sont à la charge des participants. Le déjeuner est offert par le LSPM.

Accès

LSPM, CNRS Bât L1, Université Sorbonne Paris Nord
99 Av. Jean Baptiste Clément, 93430 Villetaneuse



Villetaneuse Université



Comité d'organisation

- Christine BLANC (INPT)
- Cédric BOSCH (EMSE)
- Yann CHARLES (USPN)
- Monique GASPERINI (USPN)



9h30-10h00 : Accueil des participants

10h : **Introduction** (C. Blanc, CIRIMAT, INPT)

10h05-11h20 : **Modélisation des interactions hydrogène-matériau aux petites échelles**
(C. Becquart, UMET, Centrale Lille Institut)

- Calculs « *ab initio* »
- Dynamique moléculaire
- Monte-Carlo cinétique

11h20-12h35 : **Simulation par Eléments Finis des interactions entre diffusion-piégeage de l'hydrogène et champs mécaniques**
(Y. Charles, LSPM, USPN)

- Stratégies de développement : quelles équations pour quels codes?
- Applications : du polycristal à la structure

12h35-14h00 : Buffet-repas au LSPM

14h00-15h15 : **Simulation par Eléments Finis de la Rupture Assistée par l'Hydrogène**

(R. Estevez, SIMaP, Université Grenoble Alpes)

Approches par Zones Cohésives vs champs de phase :

- Avantages, inconvénients
- Limitations/précautions numériques et théoriques des modèles

15h15-16h30 : **Exemple de couplages diffusion - thermomécanique dans le domaine de la fusion nucléaire : du positionnement du problème à la résolution numérique**

(J. Mougnot, LSPM, USPN)

16h30 : **Conclusion** (C. Blanc, CIRIMAT, INPT)

