



Simulation de la propagation de fissures de fatigue sous hydrogène en milieu hétérogène

Contexte général

L'utilisation de l'hydrogène comme vecteur d'énergie fait partie des pistes pour réduire l'impact carbone des moyens de transport. Les hautes pressions font partie aujourd'hui des moyens les plus matures pour acheminer et stocker ce gaz d'une manière efficace. L'amélioration des réservoirs et des systèmes de transport passe par la compréhension et la maîtrise du phénomène de fragilisation par l'hydrogène dans les nuances d'acier utilisées. On observe, par exemple, une forte augmentation de la vitesse de propagation des fissures de fatigue dans les pièces métalliques lorsqu'elles sont soumises à certaines conditions de pression d'hydrogène et de chargement cyclique.

Afin de répondre à cette problématique, le Programme de Recherche Prioritaire « HyperStock » (www.celluleenergie.cnrs.fr/pepr/hyperstock/), financé par l'Agence Nationale de Recherche, met en synergie les connaissances et les moyens de plusieurs laboratoires français experts dans les matériaux pour le stockage de l'hydrogène afin d'accélérer le déploiement de masse de ces solutions technologiques, de répondre aux impératifs économiques et sociétaux de ce changement d'échelle et d'envisager une transition écologique incluant l'utilisation de l'hydrogène décarboné pour réduire notablement l'impact carbone du transport lourd. L'Institut Pprime (CNRS, ISAE-ENSMA et Université de Poitiers) et le LSPM (CNRS et Université Sorbonne Paris Nord) souhaite développer des outils de modélisation de ces phénomènes de dégradation.

L'Institut Pprime dispose de moyens d'essais permettant de caractériser les propriétés matériaux sous pression d' H_2 sous différentes conditions de sollicitation [1] et développe parallèlement des routines pour simuler la fissuration assistée par l'hydrogène [2]. Le LSPM, quant à lui, possède des outils de simulation numérique par éléments finis permettant d'effectuer des calculs couplés chemo-thermo-elastoplastiques à différentes échelles sur des structures métalliques [3,4], intégrant notamment la plasticité cristalline, le (multi)piégeage transitoire, et l'effet de la température et des champs mécaniques sur ces processus.

Programme de travail

La simulation numérique des processus d'amorçage et de propagation des fissures assistés par l'hydrogène gazeux se heurte encore à de nombreux verrous liés à la complexité et la multiplicité des phénomènes mis en jeu à différentes échelles, en particulier dans le cas de sollicitations cycliques. De ce fait, il demeure difficile de prédire quantitativement les effets de pression et de paramètres tels que la fréquence dans le cas d'un chargement cyclique en fonction du matériau étudié.

Le travail de modélisation visera à mettre en place un outil capable de prédire les effets de l'hydrogène sur la cinétique de fissuration de matériaux métalliques fragilisés, pour différentes conditions d'exposition (pression H_2 , fréquence) et de chargement (facteur d'intensité de contraintes). Il bénéficiera de l'environnement collaboratif du projet HyperStock dont certaines tâches sont dédiées aux interactions entre hydrogène et métal en surface, et hydrogène et plasticité en volume. Ces



connaissances permettront de nourrir l'approche de modélisation et d'identifier les paramètres. On utilisera la méthode des champs de phase qui permet de représenter de manière diffuse des interfaces localisées, couplée aux zones cohésives [5,6]. L'étude sera réalisée à l'échelle de l'agrégat. A ce niveau, les aléas de géométrie (tels que la taille, l'orientation et la répartition des grains) sont représentés par des distributions de champs de contraintes. Il s'agira de développer, dans le cadre de la méthode des éléments finis, un modèle d'endommagement couplant la diffusion d'hydrogène, la plasticité et la dégradation, en prenant en compte les aspects spécifiques de cumul inhérents aux chargements cycliques. Grâce à cet outil numérique, il sera possible d'évaluer différents critères de fragilisation construits soit sur la concentration locale en hydrogène, soit sur son gradient, et plus généralement, les paramètres contrôlant la propagation des fissures de fatigue. Le partenariat entre deux laboratoires permettra également de procéder à une évaluation de la robustesse et de la performance de différents logiciels d'éléments finis, qu'ils soient commerciaux (Abaqus, pour le LSPM) ou développés en interne (FoXTRoT, pour Pprime). L'approche de modélisation sera validée à l'aune de sa capacité à reproduire et donc prédire les vitesses de propagation de fissures dans des échantillons préfissurés en atmosphère hydrogénée.

Profil recherché :

Étudiant Master ou ingénieur, ayant des connaissances solides en mécanique des matériaux, en éléments finis et un intérêt pour le développement logiciel. Un goût pour les approches multiphysiques et le dialogue expérimental-numérique est un plus. Le/la doctorant.e s'inscrira à l'ISAE-ENSMA de Poitiers à la rentrée universitaire 2023. Des séjours ponctuels au LSPM sont à prévoir. L'équipe d'encadrement sera constituée de Damien HALM (Pprime, directeur de thèse), Yann CHARLES (LSPM, codirecteur) et Azdine NAIT-ALI (Pprime, coencadrant). La rémunération brute mensuelle sera de 2045€. Les candidatures sont à transmettre à damien.halm@ensma.fr, yann.charles@univ-paris13.fr et azdine.nait-ali@ensma.fr.

[1] Shinko, T., Halm, D., Benoit, G., Hénaff, G., Controlling factors and mechanisms of fatigue crack growth influenced by high pressure of gaseous hydrogen in a commercially pure iron, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2021, 112, 102885

[2] Moriconi, C., Hénaff, G., Halm, D., Cohesive zone modeling of fatigue crack propagation assisted by gaseous hydrogen in metals, *International Journal of Fatigue*, 2014, 68, pp. 56–66

[3] Singh, V., Kumar, R., Charles, Y., Mahajan, D.K., Coupled diffusion-mechanics framework for simulating hydrogen assisted deformation and failure behavior of metals, *International Journal of Plasticity*, 2022, 157, 103392

[4] Charles, Y., Mougnot, J., Gaspérini, M., Modeling hydrogen dragging by mobile dislocations in finite element simulations, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47(28), pp. 13746–1376

[5] Francfort, GA, Marigo, J-J. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *J Mech Phys Solids*, 1998, 46, pp. 1319–42.

[6] Golahmar, A., Kristensen, PK., Niordson, CF., Martínez-Pañeda, E., A phase field model for hydrogen-assisted fatigue, *Int J Fatigue*, 2022, 154, pp 106521.