



Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux – CNRS UPR 3407  
Université Sorbonne Paris Nord, Institut Galilée, 99 av. J.-B. Clément, 93430 Villetaneuse, France

**École doctorale Galilée | Galilée doctoral school**  
**Offre de contrat doctoral 2022 | Grant offer for PhD**

**Simulation numérique de la rupture des matériaux de transport ou de stockage tampon de l'hydrogène via les modèles de champ de phase**

***Numerical simulation via phase-field models of fracture in materials for the transport or the buffer storage of hydrogen***

**Directeur de thèse / Thesis supervisor :** Radhi ABDELMOULA, MC HDR 60 CNU, LSPM  
+33 1 49 40 34 76 | radhi.abdelmoula@sorbonne-paris-nord.fr

**Co-encadrant / Co-supervisor :** Patrick LANGLOIS, CR S15 CoNRS, LSPM  
+33 1 49 40 34 27 | patrick.langlois@lspm.cnrs.fr

**Note: each paragraph below has been translated into English; see *italicised text*.**

À l'instar des 7 projets de R&D et de l'équipement d'excellence (équipex) qui viennent d'être retenus dans le cadre du Programme et Équipement Prioritaire de Recherche sur l'hydrogène décarboné (PEPR-H2) et bénéficient donc, afin d'accompagner la stratégie nationale sur l'hydrogène, d'un investissement de 80 millions d'euros dans le cadre du plan d'investissement France 2030, ce sujet de thèse, bien que modeste en comparaison, s'inscrit dans la dynamique de la transition qui s'amorce entre énergies fossiles et renouvelables (EnR). Il est conçu pour apporter des réponses aux questions particulières que posent les problématiques du transport et du stockage tampon de l'hydrogène. Il s'appuie à cet égard sur les travaux expérimentaux qui ont été engagés au LSPM avec Gaz de France, actuel ENGIE, dès la création de l'ANR ; il s'agissait alors d'anticiper le passage progressif au transport de mélanges de plus en plus riches en hydrogène qui nécessitera le choix d'aciers de plus haute nuance que celle des aciers constitutifs des actuels gazoducs de transport du gaz naturel, seul l'hythane (mélange à 20 % d'hydrogène) pouvant y être transporté. En l'occurrence, pour délivrer une énergie comparable à celle du gaz naturel, il faut accroître la pression dans les gazoducs ; au titre du projet ANR PAN-H 2005 *CATHY*, la nuance X80 a à cet égard été validée [1]. La problématique du stockage tampon a, quant à elle, été étudiée au titre du projet ANR H-PAC 2009 *CESTAR* pour un parc éolien de 10 MW devant respecter ses engagements de production sous 24 h à  $\pm 15\%$  ; cette étude a mis en évidence qu'en matière de production d'énergie, la conversion de l'électricité excédentaire en hydrogène est à même de pallier l'intermittence dont pâtissent les sources d'énergie renouvelable telles que l'éolien ou le solaire, un stockage tampon permettant de réinjecter le gaz aux moments opportuns dans les réseaux électrique (après reconversion) ou gazier (par méthanation). Toutefois, ce mode de fonctionnement induit des contraintes encore plus sévères en termes de cyclage. Dans les deux cas, l'utilité du banc d'essais sur tronçons de gazoduc (DN 300, 600 ou 900), conçu et mis en œuvre au LSPM au titre de *CATHY* et également exploité au titre de *CESTAR* [1], s'est révélée précieuse pour comparer sous chargement monotone ou cyclique la tenue des tronçons d'une part selon la nature du gaz (hydrogène ou gaz neutre) et, d'autre part, pour tenir compte de l'état de ces tronçons (intacts, endommagés ou pré-entaillés) ; les résultats expérimentaux (*cf.* Fig. 1) fournissent en l'occurrence des données à même de valider les modèles prédictifs en matière de fragilisation par l'hydrogène et d'éventuelle ruine corollaire. À ce jour, aucun modèle ne donne encore satisfaction à un degré

suffisant [2] [3]; toute nouvelle approche est donc bienvenue. C'est l'esprit dans lequel s'inscrit le présent sujet de thèse.

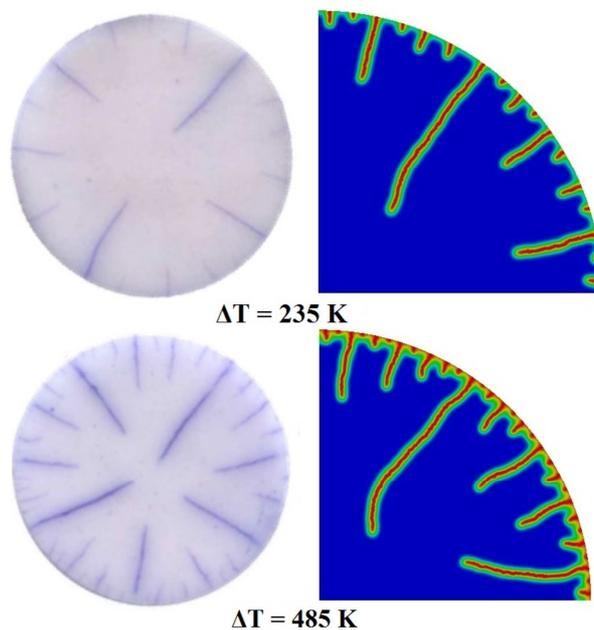
*This thesis topic falls within the framework of the on-going transition between fossil and renewable energies, and aims to contribute to address both the issues of transport and of buffer storage relating to hydrogen as energy vector. The experimental work has already been undertaken at LSPM, up to TRL 6 (prototype demonstration in an operational environment) with ENGIE as an industrial partner, through collaborative projects; the first one was anticipating the gradual transition for the transport of mixtures increasingly rich in hydrogen which will require higher-grade steels than those of the existing natural-gas transmission pipelines. Moreover, the pressure shall be increased in order to deliver the same amount of energy as compared to natural gas; the X80 grade has actually been validated in this respect [1]. Another project was dealing with the issue of buffer storage based on the  $\pm 15\%$  production commitments within 24 hours that a 10MW wind farm would have to meet; this study showed that, in terms of energy production, the conversion of excess electricity into hydrogen can compensate for the intermittency inherent to renewable energy sources, a buffer storage allowing the gas to be reinjected at the appropriate times either into the electricity network (after conversion) or into the gas one (by methanation). However, the buffer mode induces severe constraints in terms of cycling. In both cases, the test bench designed for NPS 36, 24, and 12 pipeline sections and implemented at LSPM has proved valuable for comparing under monotonous or cyclic loading the performance of such sections according, on the one hand, to the nature of the gas (hydrogen or neutral gas) and, on the other hand, to their initial condition (intact, damaged, or pre-notched); the experimental results (see Fig. 1) provide data allowing for the validation of predictive models of hydrogen embrittlement and potential corollary ruin. To date, no model is satisfactory to a sufficient degree [2] [3]; any new approach is therefore welcome, which is the rationale for this thesis topic.*



**Fig. 1 :** Essai destructif sur tronçon DN 300 pré-entaillé.  
*Destructive test on pre-notched NPS 12 pipe section.*

Les matériaux de transport ou de stockage tampon de l'hydrogène sont l'objet de phénomènes de multifissuration lorsqu'ils sont soumis à des sollicitations mécaniques dans les conditions de service évoquées ci-dessus. La modélisation des dégradations qui en résultent se fera à l'aide d'une variable d'endommagement de nature scalaire. La mécanique de l'endommagement, dont les racines se trouvent dans les travaux fondateurs de Kachanov [4], vise à décrire les phénomènes de détérioration des propriétés mécaniques consécutive à une multifissuration évolutive. Depuis environ 3 décennies, elle cherche également à prédire les conditions d'une transition de l'endommagement diffus à la rupture en termes de macrofissuration. À partir de la fin des années 80, et plus nettement dans les années 90, s'est posée la question de la régularisation des modèles via différentes approches non locales, par l'incorporation de termes de gradient d'endommagement notamment [5-7]. Une publication pionnière en ce sens a proposé [8], sur la base des travaux d'Ambrosio et Tortorelli [9], une formulation variationnelle régularisée qui se traduit par la minimisation d'une fonctionnelle à deux champs (déplacement, variable de champ de phase) sur la structure mécanique considérée. L'approche qui en découle, aujourd'hui dénommée méthode de champ de phase, fait depuis une vingtaine d'années l'objet d'un certain engouement. Malgré la popularité de ces modèles dans les problèmes purement mécaniques, leur application à la modélisation de la rupture dans les problèmes multi-physiques est toutefois beaucoup moins effective, en raison, d'une part, de la complexité théorique des phénomènes multi-physiques et, d'autre part, de la lourdeur de la mise en œuvre de ces modèles couplés dans des plateformes maison. En l'occurrence, et ainsi que l'illustre la figure 2 ci-dessous, la maîtrise des phénomènes multi-physiques est déjà satisfaisante au LSPM en matière de fissures de choc thermique par exemple.

The materials for the transport or the buffer storage of hydrogen are subject to multicracking phenomena when subjected to mechanical stresses under the service conditions mentioned above. The modelling of the resulting degradations will use a damage variable of a scalar nature. The mechanics of damage, whose roots lie with the founding works of Kachanov [4], aims to phenomenologically describe the deteriorating mechanical properties as a result of evolutionary multicracking. For about 3 decades, it has also sought to predict the conditions of a transition from diffuse damage to rupture in terms of macrocracking. Since the end of the 80s, and more clearly in the 90s, the question arose whether the regularisation of models could be dealt with non-local approaches, by the incorporation of gradient-of-damage terms in particular [5-7]. A pioneering publication [8] in this regard proposed, on the basis of the work of Ambrosio and Tortorelli [9], a regularised variational formulation that results in the minimization of a two-field functional (displacement, phase field variable) on the mechanical structure considered. The resulting approach, now called the phase-field method, has been well received for twenty years. Despite the popularity of these models in purely mechanical problems, their application for modelling fracture in multi-physical problems is however much less effective, due, on the one hand, to the theoretical complexity of multi-physical phenomena and, on the other hand, to the heavy workload required for implementing these coupled models in insourcing platforms. In this regard, as illustrated in Figure 2, the mastering of multi-physical phenomena has already been satisfactorily developed at LSPM for studying thermal-shock cracking for instance.

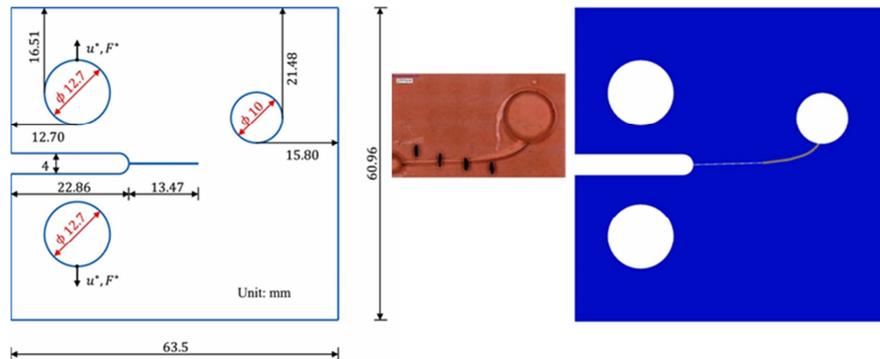


**Fig. 2 :** Comparaison entre observations expérimentales et simulations numériques [10].  
*Experimental observations (left) vs numerical simulations (right) [10].*

C'est précisément le modèle de champ de phase qui est choisi dans ce projet de thèse et les implémentations nécessaires dans la plate-forme logicielle COMSOL MULTIPHYSICS seront d'emblée effectuées. Afin de valider le modèle pour la rupture dans les problèmes multi-physiques ainsi que son implémentation numérique, une comparaison expérience – modélisation sera effectuée. La comparaison concernera non seulement les schémas de fissures qualitatifs mais aussi les réponses globales quantitatives aux données d'essais expérimentaux disponibles. Plus globalement, la rupture induite par la fissuration constitue le mode de défaillance le plus couramment rencontré dans les solides et les structures dans de nombreux autres scénarios multi-physiques, à l'instar par exemple des études de rupture fragile faites en mode mixte sur éprouvettes de ténacité (cf. Fig. 3) ou de fracturation hydraulique en milieu poreux [11] ; il est donc d'une grande importance de savoir prévoir la nucléation et la propagation d'une fissure et de pouvoir quantifier ses effets néfastes sur l'intégrité d'une structure. Pour les problèmes multi-physiques impliquant des échelles spatiales et temporelles où les tests expérimentaux sont difficiles ou beaucoup plus coûteux voire impossibles à réaliser, la simulation par ordinateur est une approche réalisable à même fournir des informations extrêmement utiles pour étudier la rupture localisée induite par la fissuration dans les solides et les structures.

*That is precisely the phase-field model which has been chosen for this thesis project and the necessary COMSOL MULTIPHYSICS software implementation will have to be completed from the outset. In order to validate this approach, a comparison between experiment and modelling will be carried out and will concern not only qualitative crack patterns but also overall quantitative responses to available experimental data. On a broader scale, crack-induced fracture is the most common failure mode encountered in solids*

and structures in many other multi-physical scenarios, as for instance in the case of mixed-mode fracturing in toughness testing (see Fig. 3) or of hydraulic fracturing in porous media [11]; it is therefore extremely important to be able to predict the nucleation and the propagation of a crack and to quantify its adverse effects on the integrity of a structure. For multi-physics problems involving spatial and temporal scales where experimental testing is difficult or much more expensive or even impossible to perform, computer simulation is a feasible approach which can provide extremely useful information for studying localised fracture induced by cracking in solids and structures.



**Fig. 3 :** Géométrie et chargement d'une éprouvette de ténacité (à gauche), observation expérimentale (au centre) et simulation numérique (à droite) [12].  
*Geometry and loading conditions of a toughness sample (left), experimentally observed crack path (centre), and numerically predicted crack pattern (right) [12].*

### Vos compétences

**Requis :** Connaissance préalable du langage de programmation Python ou MATLAB.

**Souhaitée :** Bonnes connaissances en Mécanique des milieux continus et de la rupture, ainsi qu'en Science des matériaux. Maîtrise des logiciels ABAQUS et COMSOL.

### Your skills

**Required:** Appropriate knowledge of programming language Python or MATLAB.

**Desired:** Good knowledge of Fracture and Continuum Mechanics as well as Material Science. Proficient use of ABAQUS and COMSOL softwares.

[1] Briottet L, *et al.* Recommendations on X80 steel for the design of hydrogen gas transmission pipelines. *Int. J. Hydrogen Energ.* **37** (2012) 9423-30 <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.02.009>

[2] Traidia A, *et al.* Review of hydrogen-assisted cracking models for application to service lifetime prediction and challenges in the oil and gas industry. *Corros. Rev.* **36** (2018) 323–34 <https://doi.org/10.1515/correv-2017-0079>

[3] Djukic M, *et al.* Assessment of hydrogen embrittlement and a model for structural integrity analysis. 1st Corrosion and Materials Degradation Web Conference - CMDWC 2021, 17-19 May 2021.

[4] Kachanov LM. Time of the rupture process under creep conditions. *Otd. Teck. Nauk* **8** (1958) 26-31.

[5] Frémond M, Nedjar B. Endommagement et principe des puissances virtuelles. *C. r. séances Acad. sci., Sér. 2 Méc.-phys. Chim. Sci. univers Sci. Terre* **317** (1993) 857–64.

[6] Frémond M, Nedjar B. Damage, gradient of damage and principle of virtual power. *Int. J. Solids Struct.* **33** (1996) 1083-103.

[7] Lorentz E, Andrieux S. A variational formulation for nonlocal damage models. *Int. J. Plast.* **15** (1999) 119–38.

[8] Bourdin B, Francfort GA, Marigo JJ. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *J. Mech. Phys. Solids* **48** (2000) 797–826.

[9] Ambrosio L, Tortorelli VM. Approximation of functional depending on jumps by elliptic functional via  $\Gamma$ -convergence. *Commun. Pure Appl. Math.* **43** (1990) 999–1036.

[10] Liu Y, *et al.* Experiments and numerical simulations of thermal shock crack patterns in thin circular ceramic specimens. *Ceram. Int.* **41** (2015) 1107–14 <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.09.036>

- [11] Chukwudozie C, Bourdin B, Yoshioka K. A variational phase-field model for hydraulic fracturing in porous media. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **347** (2019) 957–982  
<https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.12.037>
- [12] Chen WX, Wu JY. Phase-field cohesive zone modeling of multi-physical fracture in solids and the open-source implementation in COMSOL MULTIPHYSICS. *Theor. Appl. Fract. Mech.* **117** (2022)  
<https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2021.103153>