

Appel d'offre ½ bourse thèse 2020

## **Simulation numérique de l'endommagement induit par l'exposition d'un matériau métallique à un plasma**

Projet de thèse 2020-2023

### **Équipe de recherche d'accueil :**

(Interactions) Matériaux, Environnement, Mécanique (MEM) – Axe MECAMETA  
Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux (LSPM)  
99 avenue J.-B. Clément – 93430 Villetaneuse  
<http://www.lspm.cnrs.fr>

### **Direction de thèse :**

Y. Charles (MCF HDR - USPN) - [yann.charles@univ-paris13.fr](mailto:yann.charles@univ-paris13.fr)

### **Co-encadrement de thèse :**

G. De Temmerman (Coordinating Scientist ITER) et J. Mougenot (MCF - USPN)

### **Co-financement assuré (1/2 bourse de thèse) :**

ITER Organization (accord cadre & convention avec le SAIC) : <https://www.iter.org/>

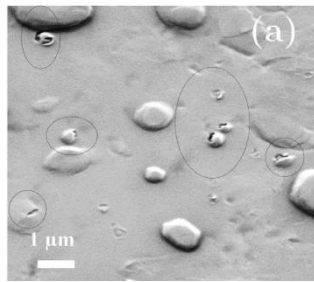
### **Résumé:**

L'objectif de ce projet de thèse est de développer un outil numérique apte à permettre de simuler l'endommagement par cloquage dans des réacteurs de fusion nucléaire (ITER), afin de pouvoir le contrôler et ainsi améliorer la durée de vie des installations. Le développement d'un tel outil numérique nécessitera la levée d'un verrou fort sur la création d'un modèle intégré de la croissance de blister (en incluant de la diffusion et la coalescence de lacunes jusqu'à la croissance de cavité sous pression) en rupture avec l'état de l'art actuel.

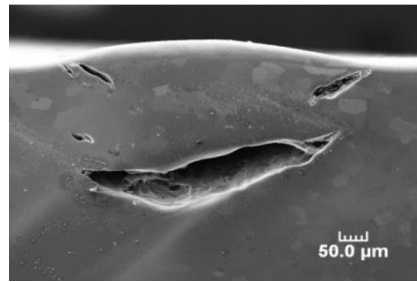
### **Contexte**

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 tokamaks). Que ce soit pour le stockage, le transport ou le confinement, ils sont 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 (p.ex dans les lacunes et/ou dislocations), les fragilise et les dégrade.

Une des manifestations de la fragilisation par l'hydrogène (FPH) consiste en l'apparition sur la surface des matériaux de cloques [1], observées expérimentalement sur de nombreux matériaux, après chargement cathodique [2] ou exposition au plasma [3] comme illustré sur la figure 1.



(a) Tungstène [4]



(b) Fer [2]

Figure 1. Cloquage observé sur différents matériaux au LSPM.

D'un point de vue qualitatif, ce cloquage résulte de la pression interne de dihydrogène issu de la recombinaison d'atomes d'hydrogène et de leur interaction avec la diffusion de lacunes. Différents modèles ont été proposés dans la littérature pour expliquer la nucléation et la croissance des bulles dans de nombreux matériaux [5]. Cependant, aucun modèle ne décrit complètement l'ensemble du processus depuis l'initiation des bulles jusqu'à la rupture. De plus, les impacts des lacunes et de la plasticité couplés à la fois au transport, au piégeage de l'hydrogène, et aux champs thermomécaniques reste un problème largement ouvert.

### Objectifs de la thèse

Ce projet de thèse vise à étendre les outils numériques développés au LSPM, et issus de travaux de thèse antérieurs [6,7], pour y intégrer ce mode d'endommagement spécifique à l'hydrogène impliquant la création de microbulles d'hydrogène dans les matériaux métalliques, en particulier lors d'une exposition par plasma. Il s'agira, dans le cadre de la mécanique des milieux continus, de formuler, d'implémenter et de tester des formulations phénoménologiques représentatives de mécanismes physiques. Le comportement mécanique sera d'abord supposé élastoplastique isotrope, et l'extension à la plasticité cristalline sera envisagée.

La stratégie retenue sera de réexaminer et d'adapter au cas de la porosité induite par l'hydrogène le modèle de Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) [8-10], utilisé pour modéliser d'une part la nucléation, la croissance et la coalescence de pores induits par la plasticité, et d'autre part, le comportement mécanique d'un métal poreux. Outre que, comme mentionné, qu'aucune modélisation globale du processus de cloquage n'est disponible dans la littérature, il est important de mentionner que l'utilisation d'un modèle de plasticité poreuse, en conjonction avec des problématiques de (multi) diffusion & piégeage est particulièrement original et prometteur [11], ouvrant la voie à une meilleure compréhension des mécanismes d'endommagement sous hydrogène intéressant de nombreuses applications, et fortement couplés.

Le travail se fera sous Abaqus, et impliquera d'une part de reprendre les outils développés lors de travaux précédents (permettant la simulation de la diffusion et du piégeage de l'hydrogène dans des structures sous chargement thermomécanique par le biais de procédures utilisateurs [6,7]), et d'autre part d'y effectuer des développements nécessaires.

Les étapes de développement sont donc les suivantes :

1. Adapter le modèle GTN à la création de bulles de  $H_2$  dans les matériaux. Ceci sera effectuée en revisitant les termes de création et de croissance de pores ;

2. Le modèle sera appliqué au phénomène du cloquage, qui est l'étape ultime de cet endommagement. Les cloques sont créées par l'amorçage et la propagation d'une fissure générée par la conjonction des contraintes résiduelles induites par la création et la croissance des bulles [12], et de la fragilisation par l'hydrogène du matériau (par exemple : zone cohésives) ;
3. Des simulations de cloquage seront effectuées sur des configurations issues de travaux antérieurs au LSPM [2-4] ou de collaborations extérieures, voire, de travaux issus de la littérature. Des extensions possibles au cas de l'élastoplasticité anisotrope et en particulier cristalline seront considérées ;
6. Enfin, des calculs seront effectués pour simuler l'endommagement induit par des cycles de chargement plasma d'éléments de stockage d'hydrogène. En particulier, l'efficacité du chargement en fonction de cet endommagement et la tenue des structures, seront regardées.

Ces travaux seront accompagnés de développements nécessiteront avant tout une prise en compte de gradients thermiques sur les processus de diffusion (effet Soret) [13], indispensable pour bien appréhender la répartition de l'hydrogène dans des structures sous chargement thermomécanique (chargement plasma), et sur l'effet de l'hydrogène sur le comportement mécanique [14-17]..

**Profil recherché :** *mécanique, dominante numérique, goût pour le dialogue avec l'expérimental et le multi-physique. La connaissance de la programmation sous Abaqus est un plus.*

Compte tenu des contraintes de nationalité liées au partenariat avec l'organisation ITER, seules les candidatures de ressortissants d'un des pays financeurs du projet ITER (UE, Suisse, Inde, Chine, USA, Russie, Japon, Corée du Sud) seront retenues.

Candidatures (CV, lettre de motivation relevé de note et lettre de recommandation) à envoyer par mail avant le 30/06/2020 à [yann.charles@univ-paris13.fr](mailto:yann.charles@univ-paris13.fr)

## Références

- [1] Ren XC, Zhou QJ, Shan GB, Chu W, Li JX, Su YJ, et al. A Nucleation Mechanism of Hydrogen Blister in Metals and Alloys. *Metall Mater Trans A* 2007;39:87–97. doi:10.1007/s11661-007-9391-3.
- [2] Ayadi S. Fissuration induite par l'hydrogène de polycristaux de fer déformés plastiquement : analyse expérimentale et simulation numérique. Université Paris 13, 2017.
- [3] Quirós C. Bulk and surface modifications of metals submitted to hydrogen plasmas: the case of aluminum and tungsten. Université Paris 13, 2017.
- [4] Ouaras K. Mécanismes de formation et dynamique du transport des poussières de carbone et de tungstène dans un plasma Micro-Onde magnétisé et non-magnétisé. Université Paris 13, 2016.
- [5] Condon JB, Schober T. Hydrogen bubbles in metals. *J Nucl Mater* 1993;207:1–24. doi:10.1016/0022-3115(93)90244-S.
- [6] Nguyen TH. Développement d'outils numériques pour la prise en compte du couplage hydrogène-plasticité dans un code éléments finis ; application à l'essai de pliage en U. Université Paris 13, 2014.
- [7] Benannoune S. Simulations EF du couplage entre diffusion et piégeage de l'hydrogène sous sollicitations thermomécaniques. Applications relatives au fer et au tungstène. Université Paris 13, 2020.
- [8] Gurson AL. Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I—

- Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media. *J Eng Mater Technol* 1977;99:2–15. doi:10.1115/1.3443401.
- [9] Tvergaard V. Influence of void nucleation on ductile shear fracture at a free surface. *J Mech Phys Solids* 1982;30:399–425. doi:10.1016/0022-5096(82)90025-4.
- [10] Tvergaard V, Needleman A. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta Metall* 1984;32:157–69. doi:10.1016/0001-6160(84)90213-X.
- [11] Fischer FD, Svoboda J. Formation of bubbles by hydrogen attack and elastic–plastic deformation of the matrix. *Int J Plast* 2014;63:110–23. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.ijplas.2013.10.007.
- [12] Ayadi S, Charles Y, Gaspérini M, Caron Lemaire I, Da Silva Botelho T. Effect of loading mode on blistering in iron submitted to plastic prestrain before hydrogen cathodic charging. *Int J Hydrog Energy* 2017;42:10555–67. doi:10.1016/j.ijhydene.2017.02.048.
- [13] Longhurst GR. The soret effect and its implications for fusion reactors. *J Nucl Mater* 1985;131:61–9. doi:10.1016/0022-3115(85)90425-8.
- [14] Cailletaud G. Une introduction à la plasticité cristalline interactions avec l'environnement. In: Viguier B, editor. *PlastOx 2007*, Argelès-Sur-Mer, France: EDP Sciences; 2009, pp. 81–115. doi:10.1051/ptox/2009008.
- [15] Birnbaum HK, Sofronis P. Hydrogen-enhanced localized plasticity - a mechanism for hydrogen-related fracture. *Mater Sci Eng A* 1994;176:191–202. doi:10.1016/0921-5093(94)90975-X.
- [16] Sofronis P, Liang Y, Aravas N. Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys. *Eur J Mech a-Solids* 2001;20:857–72. doi:10.1016/S0997-7538(01)01179-2.
- [17] Vasios N. *Crystal Plasticity. A rate-independent constitutive model. The effect of Hydrogen concentration*. University of Thessaly, Greece., 2015.