

Modélisation numérique avancée de la croissance des cavités sous sollicitations extrêmes

Contexte général

Ce projet présente des enjeux sociétaux importants, notamment dans les domaines de l'énergie et de l'environnement. La recherche sur les propriétés mécaniques des matériaux polymères sous pression s'avère cruciale pour améliorer la durabilité et la fiabilité des batteries, qui alimentent une large gamme de dispositifs électriques, allant des appareils mobiles aux véhicules électriques.

De l'hydrogène gazeux à haute pression, pouvant atteindre 90 MPa, est stocké dans les véhicules à pile à combustible et dans les stations de ravitaillement en hydrogène. De même, des matériaux en caoutchouc sont utilisés comme joints pour l'hydrogène gazeux à haute pression, soumis à une pressurisation et dépressurisation cyclique. Cette exposition cyclique entraîne la formation de cavités gazeuses à l'intérieur des matériaux en caoutchouc. Un rapport précédent a montré que le modèle de pores préexistant permet d'expliquer la croissance d'une cavité unique à l'intérieur du caoutchouc [J. Jaravel, et al., Int J Solids Struct, 2013]. Autrement dit, une cavité est déjà nucléée dans le caoutchouc sous forme de « pore préexistant rempli d'hydrogène gazeux », et ce pore préexistant se gonfle lorsque la pression externe est supprimée. La croissance de la cavité est dominée par la compétition entre les propriétés mécaniques des parois internes de la cavité et la concentration de H₂ dans la cavité, générant une pression interne dans la cavité. Une première tentative d'étude de ces phénomènes a permis une estimation de l'évolution des champs mécaniques locaux lors de la décompression d'un élastomère sous chargement mécanique (Figure 1). Mais cela sans prise en compte l'interface.

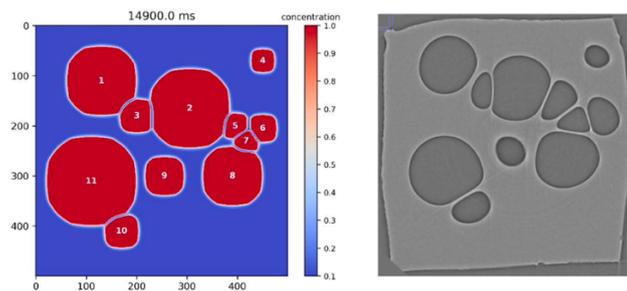


Figure 1: Comparaison des interactions entre cavités simulées (maillage 500x500, 150 itérations) (gauche) avec les interactions observées (droite) au synchrotron SOLEIL.

La maîtrise de l'évolution des interfaces matrice/cavité dans les polymères permettrait de mieux comprendre et de contrôler les phénomènes de dégradation des matériaux au fil du temps, qui influencent directement la performance de ces systèmes. En optimisant le comportement des matériaux polymères face aux contraintes mécaniques et face à la diffusion des gaz, cette recherche peut réduire les risques de défaillances prématurées et encourager le développement de technologies plus propres et durables. Les outils numériques développés dans ce cadre offrent également des avancées en simulation, permettant de réaliser des études à moindre coût énergétique et avec des précisions accrues, ce qui est essentiel pour la recherche en ingénierie verte et pour répondre aux besoins énergétiques croissants de la société. Comprendre les propriétés mécaniques des matériaux polymères sous pression revêt donc un intérêt fondamental pour contrôler l'évolution temporelle des batteries utilisées pour alimenter des dispositifs électriques. L'un des défis concernant ces matériaux est la caractérisation de l'évolution temporelle d'un certain nombre d'interfaces matrice/vide (ou gaz), de leur modification de forme, de leur effondrement et de leur fusion.

Le sujet principal de ce travail de doctorat est donc de développer des outils numériques efficaces pour modéliser les évolutions de cavité intégrée dans une matrice polymère. En effet, la méthode des champs de phase apparaît parfaitement adaptée à l'étude des interfaces en 2D. Plus précisément, des études précédentes

sur l'EPDM exposé à des pressions allant jusqu'à 30 MPa [Kane Diallo 2016] ont révélé qu'un **Élément de Volume Représentatif Morphologique**, représentatif de la distribution spatiale des cavités, inclut un nombre significatif de celles-ci. Dans la littérature, les calculs mécaniques prenant en compte la cavitation et ses effets sont généralement effectués à l'échelle de la cavité plutôt qu'au niveau d'un champ de cavités. Une raison évidente de cette limitation est la difficulté de manipulation des volumes de données et du coût de calcul rapide associé à la génération de maillages, particulièrement dans les cas d'éléments finis. De plus, les effets de l'interface matrice/cavité ne sont pas pris en compte, que ce soit en termes de diffusion ou de mécanique, comme la tension de surface, par exemple. Ensuite, pour modéliser l'évolution des cavités via la résolution d'un problème de diffusion de gaz, des simulations seront effectuées en utilisant une méthode de type champ de phase. Cette méthode de régularisation numérique nous permettra de mieux prendre en compte les échanges de gaz de part et d'autre de la paroi de la cavité. Cette méthode est appropriée pour les problèmes d'interface en régularisant les gradients forts.

L'objectif de cette thèse est de modéliser l'évolution des cavités en résolvant un problème de diffusion de gaz, en utilisant des simulations basées sur une méthode de type **champ de phase**. Cette approche de régularisation numérique renforcera notre capacité à considérer efficacement les échanges de gaz de part et d'autre de la paroi de la cavité. Le projet se déroulera en deux étapes :

Le la doctorant.e s'inscrira à l'Université de Poitiers à **la rentrée universitaire 2025**. Des séjours ponctuels au centre de l'Onera Châtillon sont à prévoir. L'équipe d'encadrement sera constituée de Azdine Naït-Ali (Isae-ENSMA/Pprime), Aurélien Vattre (Onera Châtillon) et Jérôme Colin (Université de Poitiers/Pprime).

Les candidats devront avoir de solides connaissances en mécanique des matériaux, mécanique des milieux continus et en méthode des éléments finis. Les candidatures sont à transmettre à azdine.nait-ali@ensma.fr, aurelien.vattre@onera.fr et jerome.colin@univ-poitiers.fr.