



école doctorale sciences pour l'ingénieur et microtechniques

Titre de la thèse : Etude et modélisation du comportement du lit de poudre d'hydrure métallique pour le stockage d'hydrogène

Laboratoire d'accueil : Institut FEMTO-ST, Département Mécanique Appliquée (DMA)

Spécialité du doctorat préparé : Sciences pour l'ingénieur et microtechniques

Mots-clefs : Hydrogène, stockage solide, poudre, décrépitation, modélisation par éléments discrets (DEM)

Descriptif détaillé de la thèse :

Le DMA est investi sur la thématique du stockage d'hydrogène depuis 20 ans, dans le domaine de la mécanique et des sciences des matériaux. Avec le Plan de relance, la France lance en 2020 un programme ambitieux de financements dédiés à la structuration de la filière, impliquant fortement la recherche. Le sujet proposé s'inscrit pleinement dans cette dynamique et contribue aux efforts déjà entrepris, dernièrement au cours des travaux de thèse de Ludovic Bebon (juin 2021), sur le stockage dit 'solide' d'hydrogène.

Ce sujet concerne la compréhension et la prédiction du comportement de matériaux pulvérulents dans un environnement confiné (le réservoir) lorsque des cycles de charge-décharge en hydrogène sont appliqués. Le matériau de stockage est soumis à des sollicitations fortes induisant gonflement, décrépitation, frittage... phénomènes qu'il convient de mieux appréhender en vue du dimensionnement des réservoirs. Les travaux envisagés requièrent une implication sur le volet expérimental visant l'observation et la compréhension des phénomènes que l'on veut modéliser grâce à l'outil de Modélisation par Eléments Discrets (DEM). Ce volet numérique permettant la simulation du comportement du lit de poudre constitue un point essentiel du travail à réaliser. Il fournira un outil permettant d'établir les préconisations pour le dimensionnement des réservoirs.

Références bibliographiques :

Zeaite A., Chapelle D., Cuevas F., Maynadier A., Latroche M.
Milling effect on the microstructural and hydrogenation properties of TiFe_{0.9}Mn_{0.1} alloy, Powder technology (2018) 339, 903-910
Bebon L., Maynadier A., Chapelle D., Thiébaud F.
Modeling progressive absorption of a hydride material particle submitted to hydrogen, International Journal of Hydrogen Energy (2021), Volume 46, Issue 18, 10830-10837
V. Šmilauer et al. *Yade Documentation 2nd ed.* The Yade Project (<http://yade-dem.org/doc/>), 2015

Profil demandé : Le candidat recherché aura de bonnes bases en mécanique et en sciences des matériaux. Au cours de ces 3 années de doctorat, il devra utiliser et développer ses compétences pour les caractérisations expérimentales, mais devra surtout s'impliquer dans la mise en œuvre de l'outil DEM (YADE). Nous attendons donc un candidat ayant des prédispositions et un goût avéré pour la modélisation numérique et le développement de code, la maîtrise de l'environnement Linux est un plus. L'ouverture et l'implication sont des atouts majeurs pour la réussite.

Financement : MESRI établissement
Dossier à envoyer pour le 21/07/2021
Début du contrat : octobre 2021

Direction / codirection de la thèse :
David CHAPELLE, MCF HDR, UFC
Anne MAYNADIER, MCF, UFC



école doctorale sciences pour l'ingénieur et microtechniques

PhD title : Study and modeling of the intermetallic powder bed behavior for hydrogen storage

Host laboratory : FEMTO-ST Laboratory, Department of Applied Mechanics

Speciality of PhD: Engineering Sciences and Microtechnologies

Keywords : Hydrogen, solid storage, powder, decrepitation, discret element modeling (DEM)

Job description :

The DMA has been involved in the topic of hydrogen storage for 20 years, in the field of mechanics and material sciences. With the Recovery Plan, France is launching in 2020 an ambitious funding program dedicated to the structuring of the sector, strongly involving research. The proposed subject is fully in line with this dynamic and contributes to the efforts already undertaken, recently during the thesis work of Ludovic Bebon (June 2021), on the so-called "solid" storage of hydrogen. This topic concerns the understanding and prediction of the behavior of powdery materials in a confined environment (the tank) when hydrogen charge-discharge cycles are applied. The storage material is subjected to strong stresses inducing swelling, decrepitation, sintering ... phenomena that should be better understood in view of the designing of the tanks. The planned work requires involvement in the experimental component aimed at the observation and understanding of the phenomena that we want to model using the Discrete Element Modeling (DEM) tool. This digital tool allowing the simulation of the behavior of the powder bed constitutes an essential point of the work to be carried out. It will provide a tool for establishing recommendations for the designing of tanks.

References :

Zeaier A., Chapelle D., Cuevas F., Maynadier A., Latroche M.
Milling effect on the microstructural and hydrogenation properties of TiFe_{0.9}Mn_{0.1} alloy, Powder technology (2018) 339, 903-910
Bebon L., Maynadier A., Chapelle D., Thiébaud F.
Modeling progressive absorption of a hydride material particle submitted to hydrogen, International Journal of Hydrogen Energy (2021), Volume 46, Issue 18, 10830-10837
V. Šmilauer et al. *Yade Documentation 2nd ed.* The Yade Project (<http://yade-dem.org/doc/>), 2015

Candidate Profile: The successful candidate will have good knowledge in mechanics and materials science. During these 3 years of doctorate, he will have to use and develop his skills for experimental characterizations, but will especially have to be involved in the implementation of the DEM tool (YADE). We are therefore expecting a candidate with predispositions and a proven taste for numerical modeling and code development, mastery of the Linux environment is a plus. Openness and involvement are major assets for success.

Financing Institution: University MESRI

Application deadline : 21/07/2021

Start of contract : october 2021

Supervisor(s) :

David CHAPELLE, MCF HDR, UFC

Anne MAYNADIER, MCF, UFC