

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Modélisation de l'endommagement des métaux par une approche variationnelle couplant fissures et dislocations

Référence : **MAS-DMAS-2026-06**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 01/10/2026

Date limite de candidature : juin 2026

Mots clés : fissures, dislocations, modèle variationnelle, multi-échelles

Profil et compétences recherchées : Master de physique ou équivalent, Ecole d'ingénieur avec orientation dans la science des matériaux. Physique des métaux, Plasticité, Science des matériaux, Mécanique de la rupture, Mécanique des milieux continus. Goût prononcé pour le calcul et simulations numériques (analyse formelle, programmation de codes, post-traitement).

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

La ruine des matériaux métalliques résulte généralement de processus complexes qui surviennent à l'échelle d'une microstructure d'aspect très hétérogène (présence de joints de grains, d'un très grand nombre de dislocations, d'inclusions, de vides...). A cette échelle -- intermédiaire entre les processus atomiques et celle où le comportement du matériau peut être homogénéisé -- il est nécessaire de disposer de méthodes numériques capables de décrire explicitement les objets physiques en interaction. La difficulté réside en la capacité de ces modèles à être fidèles vis-à-vis des processus physiques qu'il faut reproduire, tout en étant efficaces en termes de temps de simulation.

Dans les métaux, il faut rendre compte d'une activité plastique résultant de mouvement et de la multiplication/annihilation de nombreuses dislocations, ainsi que de la formation de microfissures ou de vides préfigurant l'endommagement. Numériquement, ces processus peuvent être reproduits explicitement par des approches spécifiques indépendantes dont le couplage reste cependant délicat [1]. Ils peuvent aussi être décrits par la méthode des champs de phase qui reposent sur l'introduction de variables auxiliaires locales caractérisant la présence des objets [2]. Là aussi, des questions non triviales sont soulevées lorsqu'il faut coupler ces variables.

Une façon de contourner ces écueils est de disposer d'une approche variationnelle unifiée qui permet de reproduire les fissures et les dislocations à l'aide du champ de déplacement uniquement. En effet, ce champ permet à lui seul d'identifier la présence de ces objets et, donc, leur évolution, aussi bien aux petites et aux grandes échelles. Depuis quelques années, de telles approches ont été proposées notamment pour décrire les dislocations ; elles reposent sur l'expression d'une énergie élastique dite non-linéaire traduisant l'invariance de cette dernière sous l'ensemble des transformations laissant invariant le réseau cristallin sous-jacent [3,4].

Au cours d'un précédent travail, nous avons repris cette description pour proposer une formulation originale qui reproduit spontanément la nucléation, l'annihilation et la propagation de dislocations, mais aussi celles des fissures via l'extension du formalisme [5]. Actuellement, le modèle est programmé à deux dimensions (2D) pour un réseau triangulaire résolu à l'échelle atomique. Il a permis avec succès de reproduire spontanément l'émission de dislocations en pointe de fissure et surtout l'amorçage de fissures en lien avec la localisation plastique. Les données d'entrée du modèle sont des quantités physiques connues (coefficients élastiques, énergie de défaut d'empilement instable, ténacité) ce qui nous permet de le calibrer très facilement pour de nombreux cristaux. Il reste cependant limité par sa formulation 2D aux petites échelles. Par ailleurs, les déformations sont actuellement mesurées vis-à-vis des positions de références des points matériels ce qui conduit à des incohérences dans le comportement physique des éléments de volumes fortement déformés (pour lesquels les positions courantes des points matériels sont trop éloignées des positions de référence).

Dans ce travail de thèse, la ou le futur.e candidat.e commencera par se familiariser avec l'outil et ses concepts en réalisant un travail bibliographique et en reproduisant des résultats antérieurs. Son premier objectif sera ensuite de *formuler et programmer* ce modèle à trois dimensions (3D). Ce passage nécessitera de mener une réflexion sur l'expression de l'énergie élastique non-linéaire à établir. L'implémentation numérique nécessitera quant à elle de réfléchir à une façon rigoureuse de mailler l'espace 3D pour un réseau cristallin cubique à face-centrée (CFC). Un deuxième objectif consistera à explorer la possibilité qu'un élément de volume du modèle contienne plusieurs mailles cristallines afin de simuler des systèmes qui ne soient pas nécessairement résolus à l'échelle atomique. Enfin, un troisième objectif consistera à modifier la description cinématique du modèle afin de quantifier les déformations locales en tenant compte des positions courantes des points matériels.

Parallèlement à ces développements formels, nous souhaiterions appliquer le modèle pour étudier l'amorçage de fissures dans deux cas : (i) celui d'un monocristal fortement plastifié (qui présente une grande densité de dislocations, et dans (ii) celui d'un système présentant des interfaces séparant des phases de nature différente (orientation cristallographique, réponse mécanique). Dans le premier cas, les objectifs seront de caractériser des mécanismes originaux d'amorçage de fissure mais aussi d'identifier une éventuelle signature statistique caractéristique du passage d'un régime purement ductile (dislocations uniquement) à un régime d'endommagement (amorce de fissures courtes). Dans le second cas, le modèle permettra de considérer naturellement d'éventuels défauts cristallins dans les interfaces. Il s'agira alors d'étudier l'influence de ces défauts sur l'évolution des interfaces ainsi que sur l'amorce de fissure susceptible de survenir dans leur voisinage.

- [1] L. Eon, Modélisation de la propagation d'une fissure courte en matériau ductile par couplage entre champ de phase et dynamique des dislocations, Ph.D. thesis, Université Paris-Saclay (2022).
- [2] A. Ruffini, A. Finel, Phase-field model coupling cracks and dislocations at finite strain, *Acta Materialia* 92 (2015) 197–208.
- [3] R. Baggio, E. Arbib, P. Biscari, S. Conti, L. Truskinovsky, G. Zanzotto, O. Salman, Landau-type theory of planar crystal plasticity, *Physical Review Letters* 123 (20) (2019) 205501.
- [4] E. Arbib, P. Biscari, C. Patriarca, G. Zanzotto, Erickson-landau modular strain energies for reconstructive phase transformations in 2d crystals, *Journal of Elasticity* 155 (1) (2024) 747–761.
- [5] G. Engrand, A. Ruffini, Y. Le Bouar, A. Finel, A nonlinear variational model of cracks and dislocations (to be published).

Collaborations envisagées

Les compétences requises sont présentes au laboratoire.

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : Matériaux et Structures

Lieu (centre ONERA) : Châtillon

Contact : Antoine Ruffini

Tél. : 01 46 73 44 43 Email : antoine.ruffini@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Yann Le Bouar

Laboratoire : LEM

Tél. : 01 46 73 45 92

Email : yann.lebouar@cnrs.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>