

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé :

Développement d'une méthode spectrale sur grilles adaptatives pour modéliser des microstructures hétérogènes hors d'équilibre.

Référence : **MAS-DMAS-2026-20**
(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 01/10/2026

Date limite de candidature : 15/06/2026

Mots clés

Méthode des champs de phases, évolution microstructurale, micromécanique, transformées de Fourier sur grilles adaptatives

Profil et compétences recherchées

Bonne connaissance en physique du solide, en science des matériaux ainsi qu'un goût prononcé pour la simulation numérique.

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Les propriétés macroscopiques des matériaux métalliques à vocation structurale ou fonctionnelle résultent du comportement physique des hétérogénéités qu'ils contiennent comme les phases qui précipitent, les inclusions, les porosités, les dislocations, ou les fissures. Le formalisme variationnel sur lequel s'appuie la méthode des champs de phase est particulièrement adapté pour reproduire les effets causés par les forces motrices d'origine chimique, mécanique, thermique, électriques ou magnétiques ainsi que leurs couplages. Parmi les différentes techniques numériques disponibles pour résoudre les équations maîtresses dépendantes du temps, les approches basées sur des transformées de Fourier (méthodes spectrales) initiées à la fin des années 90 ont, au cours des deux dernières décennies, gagné une popularité croissante en raison de leur simplicité d'emploi et de leur efficacité numérique liée à l'utilisation de transformées de Fourier rapides qui opèrent sur un système spatiallement discréteisé de manière régulière. Cette discréteisation régulière conduit cependant à une représentation « pixelisée (2D)/voxelisée (3D) » des interfaces lorsqu'elles ne sont pas conformes à la grille de calcul. Cela engendre des effets de pointe artificiels sur les champs physiques résultant de la résolution numérique des équations maîtresses. Pour réduire cet effet, on trouve dans la littérature différentes stratégies de remaillage basées sur l'utilisation de plusieurs grilles de discréteisation au sein du même calcul, sur le raffinement de la grille initiale ou sur la relocalisation des points de grilles aux endroits d'intérêts du système où les champs physiques varient fortement. Cette dernière stratégie a été appliquée avec succès par exemple à la résolution d'équations de diffusion gouvernant une évolution microstructurale [1], à la modélisation de la plasticité [2] et à des calculs d'homogénéisation numérique des propriétés mécaniques de matériaux hétérogènes [3,4]. Une technique de remaillage adaptatif basée sur un algorithme variationnel a également été récemment proposée au laboratoire. Un intérêt important des méthodes de relocalisation est de gagner en précision sans augmenter le coût mémoire, ce qui permet d'envisager la modélisation de systèmes physique de taille importante. D'un point de vue algorithmique, ce type d'approche consiste à définir une transformation inhomogène reliant l'espace physique — maillé à l'aide d'une grille irrégulière adaptée aux fortes variations des champs physiques près des interfaces — à un espace de calcul discréteisé sur une grille régulière, dans lequel sont définies les transformées de Fourier des différents champs.

Le travail de thèse proposé consistera à identifier et développer un algorithme de relocalisation capable de traiter efficacement des interfaces très diverses, telles que celles associées à des précipités, des dislocations, des cavités ou des fissures. Cet algorithme devra également présenter un coût numérique suffisamment réduit pour être intégré à chaque pas de temps dans la simulation de l'évolution d'une microstructure hors d'équilibre.

La démarche scientifique se basera sur quatre étapes :

1. Comprendre les différentes stratégies discutées dans la littérature ;
2. Proposer une méthodologie simple et générale pour définir une grille inhomogène qui s'adapte le plus fidèlement possible à des interfaces internes et des surfaces externes de formes quelconques ;
3. Adapter le code de calcul développé au LEM à une résolution sur grille non régulière ;

4. Tester les performances de la nouvelle méthode sur des cas tests et des cas d'applications (matériaux contenant différentes phases, des pores ou des fissures...).

Le travail de thèse se déroulera au sein de l'équipe « Microstructures : morphologie, plasticité, endommagement » du Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM), unité mixte de recherche ONERA-CNRS intégrée au Département Matériaux et Structures de l'ONERA. Les membres de l'équipe développent depuis de nombreuses années la méthode des champs de phase dans le domaine de la physique de la matière condensée, notamment pour l'étude des alliages multiphasés. Cette méthode permet de modéliser, à l'échelle continue, la formation de microstructures issues de transitions de phase ainsi que leur évolution sous l'effet de diverses sollicitations, telles que la température ou les contraintes mécaniques [5,6]. Elle offre également un cadre adapté à l'étude du comportement de défauts microstructuraux tels que les microfissures, les cavités ou les dislocations [7,8,9]. Parallèlement, l'équipe travaille au développement de nouveaux modèles et méthodes numériques plus performants, en particulier la méthode des champs de phase à interfaces étroites [10] et une nouvelle approche spectrale dédiée à l'homogénéisation des propriétés mécaniques des matériaux hétérogènes [11].

Références :

- [1] W.M. Feng *et al.*, Journal of Computational Physics 220 (2006) 498.
- [2] R. Santos-Güemes *et al.*, Mechanics of Materials 194 (2024) 105004.
- [3] C. Bellis *et al.*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 419 (2024) 116658.
- [4] M. Zecevic *et al.*, Mechanics of Materials 212 (2026) 105512.
- [5] U.O. Salman *et al.*, Eur. Phys. J. B (2019) 92.
- [6] M. Cottura *et al.*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 60 (2012) 1243.
- [7] P.A. Gelsin *et al.*, Acta Materialia 71 (2014) 80.
- [8] A. Ruffini *et al.*, Acta Materialia 92 (2015) 197.
- [9] B. Dabas, Acta Materialia 293 (2025) 121040.
- [10] A. Finel *et al.*, Phys. Rev. Lett. 121 (2018) 025501.
- [11] A. Finel, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 436 (2025) 117703.

Collaborations envisagées

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : Matériaux et Structures

Lieu (centre ONERA) : Châtillon (92)

Contact : Mathieu Fèvre, Yann Le Bouar, Alphonse Finel

Tél. : 01 46 73 45 94

Email : Mathieu.Fevre@onera.fr, Yann.Lebouar@cnrs.fr,
Alphonse..Finel@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Mathieu Fèvre/Yann Le Bouar

Laboratoire : Laboratoire d'étude des microstructures (UMR ONERA-CNRS)

Tél. : 01 46 73 45 94/01 46 73 45 92

Email : : Mathieu.Fevre@onera.fr,
Yann.Lebouar@cnrs.fr

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