

Offre de thèse/PhD thesis opportunity

Exploration des propriétés mécaniques à rupture par apprentissage automatique et microstructures virtuelles

Data-driven Stochastic 3D Microstructure modeling for learning mechanical properties

Directeurs de thèse/thesis directors

François Willot, Henry Proudhon

Doctoral school: École doctorale ISMME - 621 - Ingénierie des Systèmes, Matériaux, Mécanique, Énergétique

Unités de recherche et lieux/research labs and location

Centre de Morphologie Mathématique, Mines Paris (located in Fontainebleau)
Centre des Matériaux, Mines Paris (located in Evry)

Date de validité/validity

1er octobre 2021

**La thèse fait l'objet d'un financement acté de l'ANR/BMBF dans le cadre du projet "Smile".
This PhD thesis is funded by a grant from French-German research agencies obtained in May 2021.**

Sites web/web site

<http://www.mat.mines-paristech.fr/Accueil/Propositions-de-theses/>
<https://www2.cmm.minesparis.psl.eu/nous-rejoindre/>

Mots-clés/keywords

Microstructure; Imagerie 4D; Jumeau digital; Mécanique; Endommagement; Apprentissage automatique; IA et Physique; Matériaux virtuels

Microstructure; 4D imaging; Digital twin; Mechanics; Damage; Convolutional neural network; AI & Physics; Virtual materials testing

Résumé/summary

La localisation de l'endommagement, qui conduit à la rupture fragile ou ductile dans les alliages métalliques, est un phénomène induit par l'état de contrainte local au sein de la structure polycristalline. Associées aux méthodes d'apprentissage automatique, les approches numériques de la rupture par champ de phase permettent d'explorer les relations microstructure-propriétés et d'identifier les structures intéressantes du point de vue mécanique. La variété des comportements

mécaniques observés est en effet liée aux interactions entre sollicitation macroscopique appliquée et morphologie au sein de la microstructure. Cette thèse a pour but d'explorer les relations entre texture polycristalline et réponse mécanique à l'aide de simulations de morphologies représentatives prenant en compte la large gamme de formes des grains, de granulométrie ou encore de texture polycristalline rencontrées dans des matériaux réels. Pour cela une méthode d'apprentissage automatique à l'aide de calculs par transformée de Fourier rapide sera mis en place afin de déterminer des configurations d'intérêt du point de vue mécanique. On explorera le comportement à rupture par des méthodes d'apprentissage statistique et on mettra en œuvre des méthodes de classification afin d'explorer les réponses mécaniques d'alliages γ -TiAl.

Damage localization, which leads to brittle or ductile failure in metal alloys, is a phenomenon induced by the local stress state within polycrystalline microstructures. The variety of observed mechanical behaviors results from the interactions between applied macroscopic stress and morphology within the microstructure. Combined with machine learning methods, phase-field and "FFT" numerical approaches allows one to explore microstructure-property relationships and identify structures of interest in terms of mechanical response. The aim of this thesis is to explore the relationships between polycrystalline texture and mechanical response using representative morphology simulations taking into account the wide range of grain shapes, granulometry or even polycrystalline texture encountered in real materials. To do this, a machine learning method using fast Fourier transform calculations will be implemented in order to determine configurations of interest. The fracture behavior will be explored by statistical learning methods and classification methods will be implemented to explore the mechanical responses of γ -TiAl alloys.

Contexte

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet bilatéral franco-allemand en intelligence artificielle "Smile" (Data-driven Stochastic 3D Microstructure modeling for LEarning mechanical properties) et bénéficie d'un financement conjoint MESRI - BMBF.

Il se déroulera en partenariat avec l'équipe de l'*Institut für Stochastik* de l'Université d'Ulm (V. Schmidt et M. Neumann) avec qui nous aurons des visites régulières.

This thesis is part of the project "Smile" (Data-driven Stochastic 3D Microstructure modeling for LEarning mechanical properties) that benefits from a French-German funding provided by MESRI-BMBF.

It will be carried out in partnership with the Institute for Stochastic in Ulm University (V. Schmidt and M. Neumann). Regular visit will be organized with Ulm University.

Encadrement/thesis supervision

Directeurs de thèse :

François Willot - Centre de Morphologie Mathématique

Henry Proudhon - Centre des matériaux

La thèse bénéficiera de l'expertise de Volker Schmidt et Matthias Neumann (Université d'Ulm).

The thesis will benefit from the expertise of Volker Schmidt and Matthias Neumann.

But de la thèse/Goal of the thesis

Le but de ce projet de recherche est de mieux comprendre l'influence de la microstructure polycristalline sur le comportement à rupture, ductile et fragile, d'alliages γ -TiAl. De manière plus générale, le but de cette thèse est de mettre en place des outils permettant de caractériser et explorer de manière rapide le comportement mécanique de structures polycristalline.

Le programme de recherche s'articule autour de trois tâches principales, l'imagerie 3D et 4D, la modélisation des microstructures et la prédiction et l'exploration du comportement à rupture par apprentissage. La seconde tâche qui porte sur la simulation de microstructures virtuelles se déroulera à l'université de Ulm à travers une thèse parallèle, qui fait partie du même projet de recherche, tandis que les deux autres tâches feront l'objet de la thèse aux Mines.

La première tâche porte sur l'acquisition et l'analyse d'images de microstructures polycristallines et orientations locales en 3D d'échantillons de matériau γ -TiAl ainsi que de microtomographie in situ au synchrotron permettant d'accéder au faciès de fissuration en 3D+temps. Dans la seconde tâche, des microstructures polycristallines seront caractérisées et simulées virtuellement à l'aide de modèles de partition aléatoires réalistes, prenant en compte la distribution granulométrique, les formes de grains et la texture cristallographique. À une échelle inférieure, le modèle sera complété par l'ajout de macles. La troisième tâche portera sur la prédiction du comportement à rupture, effectuée à l'aide d'une méthode par champ de phase et calculs FFT, dont les prédictions seront comparées aux données expérimentales issues de deux matériaux au comportement mécanique distinct.

The objective of this research project is twofold. First, we want to assess and understand the influence of the polycrystalline microstructure on fracture, and on the ductile and brittle response of γ -TiAl alloys. Second, and more generally, we want to implement tools allowing rapid characterization and exploration of the mechanical behavior of polycrystalline structures.

The research program centers around three main tasks, 3D and 4D imaging, microstructure modeling, and the prediction and exploration of fracture by statistical learning. The second task, which concerns the simulation of virtual microstructures, will take place at the University of Ulm through a parallel thesis, which is part of the same research project, while the other two tasks will be the subject of the thesis at the Mines.

The first task concerns the acquisition and analysis of images of polycrystalline microstructures and local orientations in 3D of samples of γ -TiAl materials as well as in-situ microtomography at the synchrotron allowing access to the cracking facies in 3D+time. In the second task, polycrystalline microstructures will be characterized and virtually simulated using realistic random partition models, taking into account particle size distribution, grain shapes and crystallographic texture. On a smaller scale, the model will be completed by the addition of twinning. The third task will concern the prediction of the failure behavior, performed using a combined phase-field/FFT method, the predictions of which will be compared with experimental data from two materials with distinct mechanical behavior.

Profil

Nous recherchons un candidat détenteur d'un diplôme d'ingénieur et/ou de master recherche avec un excellent niveau scientifique, en mécanique, mathématique appliqué et/ou intelligence artificielle ainsi qu'un bon niveau de pratique en français et anglais (niveau B2 ou équivalent minimum).

Les qualités essentielles recherchées pour ce projet, qui se déroulera dans un cadre international sont : les qualités humaines, de communication, de créativité, d'autonomie et d'adaptation, mais également des capacités pédagogiques, et une forte motivation pour la recherche.

Nous apprécierons particulièrement un bon niveau en programmation, méthodes de calculs numériques et apprentissage statistique, des connaissances en mécanique.

Pour postuler, merci d'envoyer votre dossier à **francois.willot@mines-paristech.fr** comportant :
un curriculum vitae détaillé,
une lettre de motivation/projet personnel,
des relevés de notes (L3, M1, M2 ou autres)
une ou plusieurs lettres de recommandation,
les noms et les coordonnées de personne(s) pouvant être contactées pour recommandation,
une attestation de niveau d'anglais,
tout autre document complémentaire démontrant vos qualités pour cette thèse.

Engineer and / or Master of Science – excellent level in science and general culture. Good level of knowledge of French (B2 level in french is required) and English (B2 level in english is required).

Essential qualities sought for for this international project, are: human qualities, communication, creativity, autonomy and adaptation, but also teaching skills, and a strong motivation for research.

We will particularly appreciate a good level in programming, numerical calculation methods and statistical learning, knowledge of mechanics.

Applicants should supply the following :
a detailed resume,
a covering letter explaining the applicants motivation for the position,
detailed exam results ,
the name(s) and contact details of persons who may contact
an appreciation of the candidate,
your notes of M1, M2,
level of English equivalent TOEIC,
any other document establishing your qualities for this thesis

*Please send your application to **francois.willot@mines-paristech.fr***

Références/references

M. Neumann, O. Stenzel, F. Willot, L. Holzer, and V. Schmidt. Quantifying the influence of microstructure on effective conductivity and permeability: virtual materials testing. *International Journal of Solid and Structures*, 184:211–220, 2020.

H. Trumel, F. Rabette, F. Willot, R. Brenner, E. Ongari, M. Biessy, and D. Picart. Understanding the thermomechanical behavior of a TATB-based explosive via microstructure-level simulations. Part I: Microcracking and viscoelasticity. *International Pyrotechnics Seminar*, 2019. Online at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02312483>.

F. Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3):232–245, 2015.

M. Neumann, O. Furat, D. Hlushkou, U. Tallarek, L. Holzer, and V. Schmidt. On microstructure-property relationships derived by virtual materials testing with an emphasis on effective conductivity. In M. Baum, G. Brenner, J. Grabowski, T. Hanschke, S. Hartmann, and A. Schöbel, editors, *Simulation Science: First International Workshop, SimScience 2017*, Göttingen, Germany, April 27-28, 2017, Revised Selected Papers, pages 145–158. Springer, Communications in Computer and Information Science (CIS), Berlin, 2018.

H. Proudhon, M. Pelerin, A. King, and W. Ludwig. In situ 4D mechanical testing of structural materials: the data challenge. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, in press, 2020, <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2020.100834>.

F. Willot, B. Abdallah, and Y.-P. Pellegrini. Fourier-based schemes with modified green operator for computing the electrical response of heterogeneous media with accurate local fields. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 98(7):518–533, 2014.

J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, and J. Besson. Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part I: Adequacy of Fourier-based methods for cracked elastic bodies. *International Journal of Solids and Structures*, 155:248–256, 2018.

Type de financement/funding

Le doctorant sera salarié par Armines.

Le financement du projet de recherche sera assuré par l'ANR.

The PhD student will be employed by Armines.

Funding will be provided by ANR.

Contacts

François Willot et Henry Proudhon

francois.willot@mines-paristech.fr

henry.proudhon@mines-paristech.fr