

Offre de post-doctorat à l'école des Mines de Paris :

“Modélisation multi-échelle géométrique de l'endommagement ductile sous choc”

Sujet proposé par : François Willot (Mines Paris), Alizée Dubois (CEA DPTA)

Localisation : Centre de Morphologie Mathématique, site de Fontainebleau, 35 rue St Honoré, 77300 Fontainebleau. Visites au Département de physique théorique et appliqué du CEA (Bruyères le Châtel).

Durée : post-doctorat de 6 mois.

Contexte : écaillage et endommagement sous choc

La thématique de l'endommagement sous chargement dynamique — incluant les ondes de choc, l'impact et la fracture dynamique — présente de nombreuses difficultés, en raison de la diversité des phénomènes physiques impliqués et de son caractère intrinsèquement multi-échelle. Sous choc, l'interaction entre les ondes de détente issues de la réflexion du front de compression peut induire des zones de traction responsables de l'amorçage d'endommagement, pouvant conduire à la rupture du matériau, via un mécanisme d'écaillage.

Ce processus d'endommagement se déroule classiquement en plusieurs étapes : l'initiation de cavités, leur croissance, puis leur coalescence, souvent couplées à un développement local de plasticité permettant d'accommoder les déformations. Si ces mécanismes sont relativement bien décrits à l'échelle individuelle, les effets collectifs — interactions entre cavités, ou entre cavités et défauts — restent encore peu explorés, en particulier dans des contextes dynamiques.

Au stade initial de l'écaillage, la nucléation peut survenir aux joints de grains dans un polycristal (Noell et al., 2023), tandis que, dans un matériau homogène soumis à un chargement uniforme, on suppose généralement une distribution spatiale aléatoire des sites d'amorçage, qu'ils correspondent ou non à des défauts préexistants. Les cavités formées, d'abord isolées et sphériques, croissent en relâchant les contraintes locales (Trumel et al., 2009), puis coalescent selon un mécanisme d'empilement géométrique (Jacques et al., 2012), fondamentalement différent de la coalescence observée en quasi-statique.

Ce projet vise à développer des modèles probabilistes capables de décrire et de prédire la répartition spatiale ainsi que l'évolution de la porosité sous choc, dans le régime d'endommagement inertiel, afin de mieux rendre compte des mécanismes collectifs impliqués dans la rupture dynamique des matériaux. Ce travail a pour but de mettre en place des modèles probabilistes permettant de comprendre et de modéliser la répartition spatiale et l'évolution de la porosité sous chargement dynamique, dans le régime d'endommagement inertiel. (L'impact d'un projectile sur une cible produit typiquement deux ondes de choc qui se propagent dans des directions opposées, et, lorsque celles-ci rencontrent une surface libre, se réfléchissent et se rencontrent sur une surface où surviennent les phénomènes d'écaillage ductile : nucléation, croissance et coalescence de vides.)

Sous chargement dynamique, l'onde de choc produit de fortes contraintes locales qui conduisent à l'écaillage de matériaux ductiles tels que l'aluminium ou le tantale. Au stade initial de l'écaillage, dans un polycristal, la nucléation de cavités peut se produire aux joints de grains (Roy et al, 2002). Dans un matériau homogène sous chargement uniforme, on fait habituellement l'hypothèse que les sites d'amorçage, qu'il s'agissent ou non de défauts, sont répartis uniformément dans l'espace. Les cavités, isolés dans un premier temps, forment des pores sphériques qui croissent et relaxent les contraintes locales.

Problématique

La modélisation de l'écaillage repose sur plusieurs approches complémentaires :

1. Des analyses expérimentales post-mortem, telles que l'imagerie MEB ou la profilométrie, ainsi que des mesures en temps réel de la vitesse de surface libre. La mesure dynamique de la porosité et des volumes de vides demeure toutefois un défi technique (MacNider et al., 2023).
2. Des simulations numériques macroscopiques, couplées à
3. Des modèles analytiques d'homogénéisation prenant en compte les effets inertiels et visqueux, ainsi que les lois de comportement en dynamique. La solution classique de la « sphère creuse » permet notamment de modéliser la croissance des cavités.
4. Des modèles à champ complet de type champ de phase, et
5. Des données issues de la dynamique moléculaire (DM).

Malgré leur potentiel, les données issues de la DM restent encore peu exploitées. Cela tient notamment aux défis liés au traitement de données massives, à l'analyse d'image, mais aussi aux difficultés de caractérisation probabiliste de ces processus. Des outils issus du calcul haute performance commencent cependant à émerger (Babilotte et al., 2024).

Sur le plan conceptuel, l'écaillage peut être rapproché de phénomènes tels que la percolation ou les avalanches, bien connus en physique statistique. Néanmoins, peu de travaux s'attachent à adapter ces cadres au contexte spécifique de l'endommagement sous choc, dans lequel ils pourraient pourtant s'avérer pertinents. En particulier, des modèles probabilistes géométriques pourraient permettre de modéliser la percolation de cavités dans le régime inertiel.

Plusieurs questions clés se posent alors :

- (i) Quel est l'impact d'une répartition multi-échelle (par loi de puissance) des tailles de vides sur les seuils de percolation ?
- (ii) Quels ingrédients seraient nécessaires dans un modèle probabiliste 3D et temporel pour reproduire les exposants de percolation et l'évolution de la distribution des agrégats de pores ?
- (iii) La notion de porosité accélérée, chère à la communauté mécanique de l'endommagement, reste-t-elle pertinente dans un cadre inertiel ?

Enfin, les modèles d'ensembles aléatoires développés au CMM (Willot, 2015), étroitement liés aux outils de morphologie mathématique, offrent un cadre rigoureux pour la description de structures hiérarchiques multi-échelles. Par exemple, la capacité de Choquet, appliquée à des éléments

structurants de taille croissante, permet de calculer la dimension de Hausdorff d'un ensemble fractal (Makarenko et al., 2012). De telles structures apparaissent naturellement lors de processus hiérarchiques, comme la coalescence de vides induite par la propagation de fissures (Lakhal et al., 2025). Ces outils offrent une base rigoureuse pour comprendre la transition entre la croissance dispersée de cavités et l'émergence d'une surface écaillée dont la rugosité porte la signature des processus collectifs de coalescence.

But de l'étude et plan de travail

Les données de dynamique moléculaire fournissent des nuages de points en trois dimensions représentant les atomes et leur évolution au cours du temps. Les données de simulation accessibles contiennent à l'heure actuelle plusieurs milliards d'atomes à partir desquels il est possible de déterminer des milliers (voir des millions) de vides. Au cours du post-doctorat, on analysera ces données en mettant en place un modèle géométrique de complexité « incrémentale » prenant en compte :

- (i) la germination des cavités selon un modèle statistique (processus de points) ;
- (ii) la croissance-coalescence de pores ;
- (iii) les distributions de taille (loi de Zipf) observées notamment à la percolation ;
- (iii) si nécessaire une répartition inhomogène (à grande échelle) de l'endommagement.

On validera ces différents modèles à l'aide des données issues de la dynamique moléculaire. Le but principal est d'améliorer la compréhension de la physique sous-jacente.

Références

Noell P. J. et al., (2023), *Void nucleation during ductile rupture of metals : A review*, *Progress in Material Science* **135**, 101085

Roy, G., Dragon, A., Trumel, H., Llorca, F., 2002. Spall damage modelling. Inertia effects in fully elastic plastic range. In: Khan, A.S., Lopez-Pamies, O. (Eds.), *Proceedings of the 9th International Symposium on Plasticity and its Current Applications (Plasticity 2002)*, Aruba, The Netherlands, pp. 666–668.

Trumel H. et al., (2009) On probabilistic aspects in the dynamic degradation of ductile materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **57** , 1980-1998

Jacques, N., Mercier, S., and Molinari, A. (2012). Void coalescence in a porous solid under dynamic loading conditions *Int J Fract*, 173:203–213

MacNider, B. et al., (2023) In situ measurement of damage evolution in shocked magnesium as a function of microstructure, *Science Advances* **9**(45)

Babilotte K. et al., On-the-fly clustering for exascale molecular dynamics simulations, *Computer Physics Communication* **307** (2025), 109-427

Lakhal S., et al (2025) Wrapping and unwrapping multifractal fields: Application to fatigue and abrupt failure fracture surfaces *Physical Review Research* **7** (1), L012003

Makarenko, N. G., Karimova, L. M., Kozelov, B. V., & Novak, M. M. (2012). Multifractal analysis based on the Choquet capacity: Application to solar magnetograms. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **391**(18), 4290-4301.

Willot, F. (2015). The power laws of geodesics in some random sets with dilute concentration of inclusions. In *Mathematical Morphology and Its Applications to Signal and Image Processing: 12th International Symposium, ISMM 2015, Reykjavik, Iceland, May 27-29, 2015. Proceedings* **12** (pp. 535-546). Springer International Publishing.