

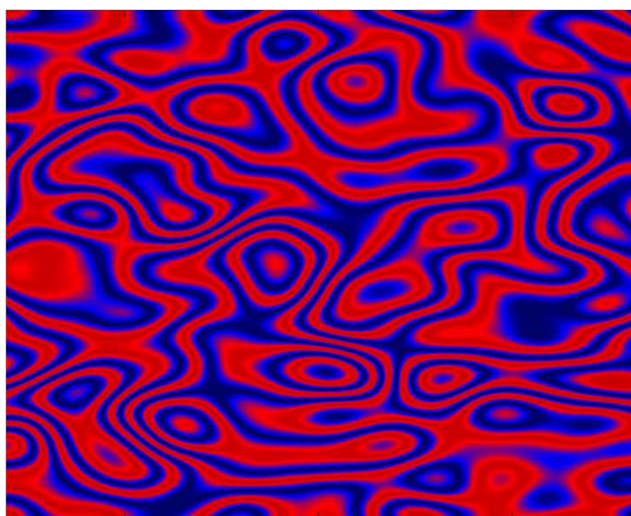
Stage de recherche : Calcul de coefficients homogénéisés pour des matériaux modélisés par champs gaussiens.

Les matériaux à microstructure hétérogène aléatoire, tels que le combustible nucléaire, présentent au niveau macroscopique un comportement thermique ou mécanique équivalent à un matériau *homogène* [1]. Cette réduction drastique de la complexité par séparation d'échelles est très profitable à la modélisation. Toutefois, l'obtention des caractéristiques *homogénéisées* du matériau virtuel (conduction thermique, tenseur de rigidité) à partir de la description de la microstructure du matériau est ardue. Deux approches sont généralement employées:

-d'une part, des *lois homogénéisées analytiques*, qui reposent sur des calculs valides dans certains régimes spécifiques (par exemple, les lois de Voigt, Reuss, Mori-Tanaka [5]...);

-d'autre part, la simulation numérique par un *Volume Élémentaire Représentatif* [4].

La première approche est peu coûteuse, mais d'une fiabilité et d'une précision parfois insuffisante, tandis que la seconde est robuste et générique mais nécessite une grande puissance de calcul.



Un champ gaussien

L'objectif du stage est d'explorer une troisième voie, dans le cadre particulier des matériaux modélisés par des champs gaussiens. Cette modélisation a récemment été introduite pour des combustibles, notamment le MOX, dans la thèse [3]. Parallèlement, de tels ensembles aléatoires présentent des propriétés mathématiques permettant une analyse fine du calcul de la matrice homogénéisée [2]. L'approche de ce stage est d'employer des outils de [2] afin de proposer un calcul efficace du coefficient homogénéisé.

Ce sujet est ambitieux et demandera de la créativité ; il s'inscrit dans une perspective de recherche fondamentale. En cas de succès, le stage débouchera sur une publication scientifique de haut niveau (en mathématiques numériques), en sus des retombées applicatives pour la modélisation du combustible par le CEA. Le candidat choisi sera un excellent étudiant en M2 ou M1 en mathématiques appliquées maîtrisant l'analyse variationnelle et ayant une bonne connaissance du calcul scientifique.

Bibliographie :

- [1] G. Allaire. Shape optimization by the homogenization method. 2002.
- [2] N. Clozeau, M. Josien, F. Otto, and Q. Xu. Systematic error in computation of the homogenized matrix. in preparation.
- [3] A. El Abdi. Génération 3D aléatoire de microstructures de combustibles nucléaires MOX et homogénéisation mécanique. 2021.
- [4] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. 2003.
- [5] S. Torquato. Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties. 2002.

Formation souhaitée :	M1 ou M2 d'analyse des EDP ou de mathématiques appliquées
Durée du stage :	6 mois
Méthode/logiciel(s) :	Maîtrise d'un langage de calcul scientifique recommandée (Python, Julia, C++...)
Mots clés :	Homogénéisation, Champs aléatoires

Lieu du stage :	Cadarache, DES/IRENE/DEC/SESC/LM2C
Possibilité de thèse :	Non
Contact :	JOSIEN Marc, marc.josien@cea.fr

Stochastic homogenization of Gaussian fields

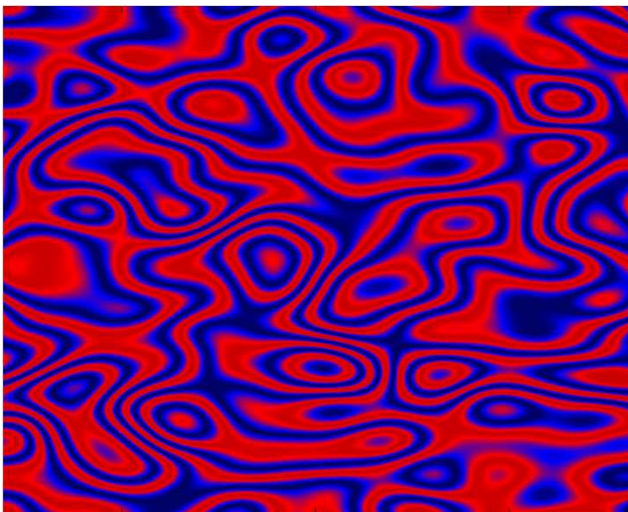
Heterogeneous materials with random microstructures, such as nuclear fuels, behave on the macroscopic scales as *homogeneous* materials [1], from the point of view of thermics or mechanics. This reduction of complexity by scale separation is highly valuable for modelling. However, the *homogenized* properties (thermal conductivity, stiffness tensor) are not easily retrieved from the microstructure description. Two approaches are generally used :

-appealing to *analytical homogenization rules* which are valid in specific regimes (*e.g.* Voigt, Reuss, Mori-Tanaka [5]...) and then extrapolated;

-numerical simulations on a *Representative Volume Element* [4].

The first approach is free of computation cost, but with limited reliability and precision, whereas the second one is robust and versatile, but requires a large amount of computational resources.

This internship aims at exploring a third way, in the



special framework of models based on Gaussian fields. On the one hand, these models were only recently introduced in the field of nuclear fuels, notably for MOX fuels, in the PhD thesis [3]. On the other hand, such random fields enjoy mathematical properties that allow for finely analyzing the RVE strategy [2]. The approach of this internship relies on tools of [2] in order to propose an efficient way of computing the homogenized coefficient.

This subject is ambitious and requires creativity, and should be considered as fundamental research in numerical and pure analysis. In case of success of the method, it will lead to a publication in an international peer-reviewed journal –and will have concrete applications to the nuclear fuels.

The chosen candidate will have an excellent background in the mathematical analysis of PDEs and variational methods and in scientific computing.

References :

- [1] G. Allaire. Shape optimization by the homogenization method. 2002.
- [2] N. Clozeau, M. Josien, F. Otto, and Q. Xu. Systematic error in computation of the homogenized matrix. in preparation.
- [3] A. El Abdi. Génération 3D aléatoire de microstructures de combustibles nucléaires MOX et homogénéisation mécanique. 2021.
- [4] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. 2003.
- [5] S. Torquato. Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties. 2002.

Formation required :	Applied maths, analysis of PDEs	Location :	Cadarache, DES/IRENE/DEC/SESC/LM2C
Duration :	6 months	Possibility to pursue with a PhD thesis:	No
Calculation tools, computers :	Programming for numeric computing: Python, Julia, C++...	Contact :	JOSIEN Marc, marc.josien@cea.fr
Keywords :	Stochastique homogenization, random fields		