



PhD position

Modeling of rocks and their geological evolution using digital material

The study of many complex geological phenomena lies in understanding the rocks of the lithosphere and their evolution over time. The underlying mechanisms (deformation mechanisms, recrystallization, grain growth, phase changes and more generally diffusional mechanisms) take place at the microstructure scale and transcend materials in the sense that they are common to many classes of materials (rocks, ice, metals). It is in this multidisciplinary context that GéoAzur at UCA/OCA - UMR 7239 and CEMEF de MINES ParisTech - UMR 7635 have been working together for 4 years to form a transversal team of researchers and resources (Jean Furstoss, Carole Petit, Clément Ganino, Daniel Pino Muñoz and Marc Bernacki) at the service of this topic to provide innovative digital solutions in order to understand these phenomena.

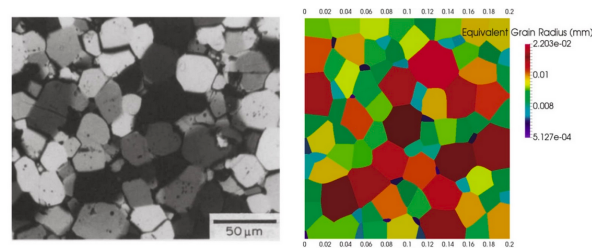
In 4 years, the work carried out and published^{abcde} in renowned journals at the crossroads of the various disciplines cited illustrates the potential and originality of the approach (See Figure on the right). The socio-economic and environmental impact of such research is also important through the diversification of the underlying digital models which are also at the service of concrete industrial applications in digital metallurgy for which CEMEF is recognized (consortium DIGIMU).

The proposed thesis is part of this process of developing digital material in the service of modeling in geology. The main idea is to improve and add new physical mechanisms to the existing numerical framework. These physical mechanisms lie at the intersection of mechanics, chemistry and heat transfer. In this project, the main developments are mainly related to the mechanics and the diffusion phenomena of chemical species.

From a mechanical point of view, it is possible to describe the rheology of the material using crystal plasticity. This crystal plasticity approach makes it possible to take into account the crystallography of the material in the mechanical calculations. These mechanical calculations can be used to estimate the energy stored during plastic deformation, the nucleation modes as well as the evolution of the material's texture.

Using inverse analysis techniques, it is possible to identify the parameters of these crystal plasticity laws. At present, the predictions of the evolution of the texture do not allow us to reproduce the experimental observations. A first part of the thesis will therefore consist in developing a new law of crystal plasticity that allows to simultaneously reproduce the evolution of internal energy, the mechanical response and the texture of the material.

🏠	Université Côte d'Azur Géoazur 250 rue Albert Einstein CS 10269 06905 Sophia Antipolis, France <i>PhD supervisors</i>
✉	clement.ganino@unice.fr daniel.pino_munoz@mines-paristech.fr <i>Co-advisors</i>
✉	carole.petit@unice.fr marc.bernacki@mines-paristech.fr



Numerical modeling of grain growth in 2D (right) compared to experimental measurements (left)^a

This new law of crystal plasticity will then be used to study dynamic or static recrystallization phenomena.

The second part of the thesis will be dedicated to the study of diffusive phenomena and their impact on grain boundary migration. Most rocks on Earth are indeed materials made up of different solid phases. It is thus important to be able to predict the evolution of its phases during recrystallization mechanisms. An explicit modeling of these different mechanisms will be developed.

Once these two objectives have been achieved, simulations on a geological time scale will be carried out in order to better understand the kinetics of the microstructural changes observed on natural samples and the impact of these different mechanisms. In this way, we hope to be able to explain the kinetics of formation of the zones of localization of the deformation which are thought to be at the origin of the tectonic plates.

The proposed developments will take place in a finite element library developed at CEMEF. This library is written in C++ and is based on a MPI parallelization.

CANDIDATE PROFILE

The candidate must have a strong interest for digital modeling and programming. Knowledge of mechanics is required and basics on geology are an asset.

PARTNERS

The PhD candidate will be based at GéoAzur which is located 200m from CEMEF and will be registered at the Doctoral School École Doctorale "Sciences Fondamentales et Appliquées" (ED SFA).

^aFurstoss, J., Bernacki, M., Ganino, C., Petit, C., and Pino Muñoz, D. (2018). 2D and 3D simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 283, 98-109.

^bFurstoss, J., Bernacki, M., Petit, C., Fausty, J., Pino Muñoz, D., and Ganino, C. (2020). Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions: application to peridotites. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 125(1), e2019JB018138.

^cFurstoss, J., Petit, C., Tommasi, A., Ganino, C., Pino Muñoz, D., and Bernacki, M. (2021). On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics. *Geophysical Journal International*, 224(2), 1360-1370.

^dFurstoss, J., Sarrazola, D. A. R., Bernacki, M., and Pino Muñoz, D. (2021). Handling tensors using tensorial Kelvin bases: application to olivine polycrystal deformation modeling using elastically anisotropic CPFEM. *Computational Mechanics*, 67(3), 955-967.

^eFurstoss, J., Petit, C., Ganino, C., Bernacki, M., and Pino Muñoz, D. (2021). A new finite element approach to model microscale strain localization within olivine aggregates. *Solid Earth Discussions*, 1-29.



Sujet de thèse

Le matériau numérique au service de la modélisation des roches et de leurs évolutions géologiques

L'étude de nombreux phénomènes géologiques complexes réside dans la compréhension des roches de la lithosphère et de leurs évolutions au cours du temps. Les mécanismes sous-jacents (mécanismes de déformation, recristallisation, croissance de grains, changements de phases et plus généralement mécanismes diffusifs) prennent place à l'échelle de la microstructure et transcendent les matériaux au sens où ils sont communs à de nombreuses classes de matériaux (roches, glace, métaux). C'est dans cette optique multidisciplinaire et de synergie que le centre GéoAzur de l'UCA/OCA - UMR 7239 et le centre CEMEF de MINES ParisTech - UMR 7635 se sont rapprochés depuis 4 ans pour constituer une équipe transversale de chercheurs et de moyens (Jean Furstoss, Carole Petit, Clément Ganino, Daniel Pino Muñoz et Marc Bernacki) au service de cette thématique pour apporter des solutions numériques innovantes afin de faire émerger des éléments de réponse à des problématiques géologiques complexes et ouvertes dans la communauté.

En 4 ans, les travaux réalisés et publiés ^{a b c d e} dans des revues de renom à la croisée des différentes disciplines citées illustrent le potentiel et l'originalité de la démarche (Voir Figure à droite). L'impact socio-économique et environnemental de telles recherches est aussi important par la diversification des modèles numériques sous-jacents qui sont également au service d'applications industrielles concrètes en métallurgie numérique pour lesquelles le CEMEF est reconnu (consortium DIGIMU).

La thèse proposée s'inscrit dans cette démarche du développement du matériau numérique au service de la modélisation en géologie ; les axes privilégiés concerneront l'amélioration et l'enrichissement des mécanismes actuellement modélisés. Ces mécanismes physiques se trouvent à l'intersection entre la mécanique, la chimie et thermique. Les développements envisagés dans le cadre de cette thèse seront principalement liés à la mécanique et aux phénomènes de diffusion d'espèces chimiques.

D'un point de vue mécanique, il est possible de décrire la rhéologie du matériau en utilisant la plasticité cristalline. Cette plasticité cristalline permet de prendre en compte la cristallographie du matériau dans les calculs mécaniques. Ces calculs mécaniques peuvent être utilisés afin d'estimer l'énergie stockée lors de la déformation plastique, les modes de germination ainsi que l'évolution de la texture du matériau.

En utilisant des techniques d'analyse inverse, il est possible d'identifier les paramètres de ces lois de plasticité cristalline. A l'heure actuelle, les prédictions d'évolution de la texture ne permettent pas de reproduire les observations expérimentales. Un premier volet de la thèse consistera donc à développer une nouvelle loi de plasticité cristalline permettant de reproduire simultanément l'évolution de l'énergie interne, la réponse mécanique et la texture du matériau.

a. Furstoss, J., Bernacki, M., Ganino, C., Petit, C., and Pino Muñoz, D. (2018). 2D and 3D simulation of grain growth in olivine aggregates using a full field model based on the level set method. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 283, 98-109.

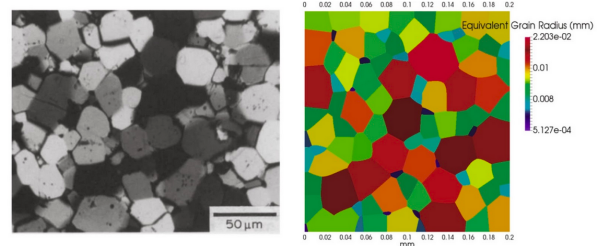
b. Furstoss, J., Bernacki, M., Petit, C., Fausty, J., Pino Muñoz, D., and Ganino, C. (2020). Full field and mean field modeling of grain growth in a multiphase material under dry conditions : application to peridotites. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 125(1), e2019JB018138.

c. Furstoss, J., Petit, C., Tommasi, A., Ganino, C., Pino Muñoz, D., and Bernacki, M. (2021). On the role of solute drag in reconciling laboratory and natural constraints on olivine grain growth kinetics. *Geophysical Journal International*, 224(2), 1360-1370.

d. Furstoss, J., Sarrazola, D. A. R., Bernacki, M., and Pino Muñoz, D. (2021). Handling tensors using tensorial Kelvin bases : application to olivine polycrystal deformation modeling using elastically anisotropic CPFEM. *Computational Mechanics*, 67(3), 955-967.

e. Furstoss, J., Petit, C., Ganino, C., Bernacki, M., and Pino Muñoz, D. (2021). A new finite element approach to model microscale strain localization within olivine aggregates. *Solid Earth Discussions*, 1-29.

Université Côte d'Azur
Géoazur 250 rue Albert Einstein CS 10269
06905 Sophia Antipolis, France
Directeurs de thèse
clement.ganino@unice.fr
daniel.pino_munoz@mines-paristech.fr
Co-encadrants
carole.petit@unice.fr
marc.bernacki@mines-paristech.fr



Modélisation numérique de la croissance de grains en 2D (à droite) comparée à des mesures expérimentales (à gauche)^a

Cette nouvelle loi de plasticité cristalline sera ensuite utilisée pour étudier des phénomènes de recristallisation dynamique ou statique.

La deuxième partie de la thèse sera dédiée à l'étude de phénomènes diffusifs et de leurs impacts sur la migration des joints de grain. La plupart des roches terrestres sont en effet des matériaux constitués de différentes phases solides. Il est donc important, dans la recherche de modèles prédictifs, d'être capable de prédire l'évolution de ses phases lors des mécanismes de recristallisation. Une modélisation explicite de ces différents mécanismes est donc visée.

Une fois ces deux objectifs atteints, des simulations sur une échelle de temps géologique seront menées de façon à mieux comprendre la cinétique des évolutions microstructurales observées sur des échantillons naturels et l'impact des différents mécanismes à l'œuvre. On espère ainsi pouvoir expliquer la cinétique de formation des zones de localisation de la déformation que l'on pense être à l'origine des plaques tectoniques.

Les développements proposés auront lieu dans une librairie de calcul par éléments finis qui est développé au CEMEF. Cette librairie est en C++ et basée sur une parallélisation de type MPI.

PROFIL RECHERCHÉ

Le candidat recherché devra avoir un goût prononcé pour la modélisation numérique et la programmation. Des connaissances en mécanique des matériaux et une appétence pour la géologie sont nécessaires.

PARTENAIRES

Le thésard sera basé à GéoAzur qui se trouve à 200m du CEMEF et sera inscrit à l'École Doctorale "Sciences Fondamentales et Appliquées" (ED SFA)