

## Sujet de thèse

# Développement de la méthode des éléments virtuels pour la modélisation multiphysique : application aux matériaux actifs architecturés

**Mots clés :** Matériaux architecturés magnétoélectriques, couplage électro-magnéto-mécanique, méthode des éléments virtuels, méthode des éléments de frontière, multi-échelle, homogénéisation, ferroélectrique, ferromagnétique, multiferroïques.

---

**Résumé :** Les matériaux multiferroïques magnétoélectriques combinent des propriétés électriques et magnétiques couplées, mais sont rares et peu performants à l'état intrinsèque. Des composites ferroélectriques/ferromagnétiques permettent d'obtenir un couplage plus fort via des interactions mécaniques. Les matériaux architecturés offrent une voie prometteuse pour améliorer ces performances grâce à des structures conçues à une échelle intermédiaire. Leur étude nécessite des outils numériques avancés comme la méthode des éléments virtuels (VEM), encore peu exploitée, notamment pour des analyses multi-échelles et multiphysiques.

**Contexte :** Les composés multiferroïques magnétoélectriques présentent la rare propriété de posséder simultanément des paramètres d'ordre électrique et magnétique qui interagissent [1]. Cette coexistence, peu fréquente au sein d'un même composé, autorise la manipulation de l'amplitude ou de l'orientation de l'aimantation (resp. la polarisation) au sein d'un composé par l'application d'un champ électrique (resp. magnétique). En dépit des efforts de recherche, les composés multiferroïques magnétoélectriques intrinsèques restent peu nombreux et les couplages observés toujours faibles. Pour contourner cette difficulté et obtenir des couplages magnétoélectriques importants, des structures composites constituées de phases ferroélectriques et ferromagnétiques, obtenues par un empilement de couches laminaires ou par des inclusions de particules dans une matrice, ont été élaborées [2]. Il en résulte un couplage magnétoélectrique extrinsèque, où la déformation mécanique induite constitue le vecteur d'interaction.

Une piste prometteuse pour améliorer ces matériaux composites réside dans l'approche des matériaux architecturés [3, 4, 5]. Ceux-ci présentent une échelle d'organisation intermédiaire entre l'échelle macroscopique (échelle de référence) et l'échelle microscopique (échelle des constituants). Cette mésostructure à la géométrie (topologie et morphologie) conçue sur mesure permet d'atteindre des comportements effectifs non-standard, tant en statique qu'en dynamique, et ainsi dépasser les limites des matériaux monolithiques. La plupart des études sur les matériaux architecturés se sont limitées à la fabrication de structures périodiques en petites tessellations et à leur analyse dans des conditions essentiellement quasi-statiques, mais l'exploration de conceptions architecturales plus complexes et de leurs propriétés à différentes échelles de longueur et de temps est essentielle pour révéler pleinement le potentiel de cette catégorie de matériaux.

La compréhension et la prédiction du comportement de dispositifs basés sur l'utilisation de matériaux actifs architecturés nécessitent des approches de modélisation numériques avancées, capables de traiter les effets multi-échelles et de rendre compte des comportements non-linéaires, anisotropes et dissipatifs. La méthode des éléments virtuels (VEM) [6, 7] est une méthode numérique récente qui a montré un potentiel important pour la simulation. Elle étend les capacités de la méthode des éléments finis (FEM) en traitant des maillages polygonaux/polyhédriques très généraux, y compris des éléments irréguliers ou non convexes, tout en conservant de bonnes propriétés de convergence et de stabilité. Elle se révèle par ailleurs plus efficace et plus robuste que la FEM en présence d'anisotropie marquée. Son application dans le domaine des matériaux actifs architecturés reste

encore largement à explorer, notamment en ce qui concerne la prise en compte des interactions à différentes échelles. Par ailleurs, pour traiter les problèmes à volume d'air important en comparaison de la structure "active", le couplage de la VEM avec la méthode des éléments de frontière (BEM) reste possible, l'approche FEM-BEM ayant montré toute son efficacité dans le traitement de problèmes multiphysiques [8].

**Objectifs et étape de la thèse :** L'objectif principal de cette thèse est d'explorer et de développer l'application de la méthode des éléments virtuels pour la modélisation multiphysique et l'optimisation de matériaux actifs architecturés. Cette approche permettra de mieux comprendre les interactions complexes entre la micro-structure, les champs locaux (électrique, magnétique et mécanique) et les performances à l'échelle macroscopique de cette catégorie de matériaux. Plus spécifiquement, les travaux de la thèse porteront sur les axes suivants :

- **Dérivation de modèles de comportements**

Un premier axe de travail portera donc sur la dérivation et la mise en œuvre d'un modèle de matériau pour la description des effets non-linéaires, d'anisotropies et de couplages des phases ferromagnétiques et ferroélectriques. Cette modélisation reposera sur une approche énergétique et une description multi-échelle des mécanismes sous-jacents.

- **Développement de la méthode des éléments virtuels**

Ce deuxième axe de travail portera sur l'élaboration d'une formulation à deux échelles pour la simulation de matériaux magnétoélectriques architecturés basée sur la méthode VEM. Pour ce faire, un cadre numérique basé sur la VEM pour la résolution de problèmes multiphysiques sera mis en place. Une stratégie itérative de résolution à deux échelles, à l'instar de la méthode FE2 [9, 10], sera définie en lien avec les modèles de comportement pour déterminer la réponse à l'échelle macroscopique à partir de la résolution d'un ensemble de problèmes mésoscopiques définis sur des volumes élémentaires représentatifs (VER). Ces deux échelles interagissent par des procédures de descente et de remontée d'informations jusqu'à convergence. Cependant, le coût de calcul numérique associé à ces approches multi-échelle reste toujours élevé. A cette fin, la capacité des Graph Neural Networks (GNNs) [11] à estimer le comportement homogénéisé de VERs peut constituer une alternative efficace. La généralisation des GNNs dans un scénario multimatériaux pourra être évaluée.

- **Modélisation de matériaux magnétoélectriques architecturés**

Pour ce dernier axe la modélisation développée sera utilisée pour étudier le comportement de matériaux magnétoélectriques architecturés, en fonction des conditions de charge et des propriétés des matériaux et géométriques. Des approches d'optimisation paramétrique ou topologique seront explorées pour concevoir des matériaux architecturés avec des performances maximisées pour des applications spécifiques (micro-sources d'énergie harvesting, capteurs à haute sensibilité, micro-moteurs et micro-actionneurs, dispositifs pour la santé, etc.).

### **Profil de l'étudiant·e - Compétences requises :**

Le ou la candidat·e devra être titulaire d'un Master (M2) ou d'un diplôme d'Ingénieur en mécanique, génie électrique, mathématiques appliquées ou physique appliquée. Il ou elle devra avoir des compétences en électromagnétisme, en mécanique des solides déformables, en méthodes numériques (éléments finis) et en programmation scientifique (Python, Java, Matlab, ...). En outre, le ou la candidat·e doit montrer un fort intérêt pour la modélisation numérique et le développement de codes de calcul scientifiques. Il ou elle doit être motivé·e par la recherche appliquée en collaboration avec des chercheurs de différentes disciplines. Une bonne maîtrise de l'anglais et des capacités de rédaction sont requises.

### Informations pratiques :

**École doctorale :** Électronique, Électrotechnique, Automatique, Traitement du Signal

**Spécialité :** Génie Électrique

**Établissement de préparation :** Université Grenoble Alpes

**Financement :** Non encore acquis, la personne retenue devra **présenter le concours de l'école doctorale EEATS** de l'Université Grenoble Alpes pour obtenir une bourse ministérielle.

**Début de la thèse :** 1<sup>er</sup> octobre 2026 (peut-être légèrement repoussé)

**Lieu de la thèse :** Laboratoire de Génie Électrique de Grenoble (G2ELab : <https://g2elab.grenoble-inp.fr/>)

Le Laboratoire de Génie Électrique de Grenoble (G2ELab) est reconnu pour son action en modélisation numérique de calcul des champs électromagnétiques, notamment par la méthode des éléments finis et les méthodes intégrales (méthode des moments magnétiques, méthode intégrale de volume, méthode PEEC (Partial Element Equivalent Circuit)) ainsi que le couplage des méthodes numériques.

**Encadrement :** Nicolas Galopin - 04 76 82 71 77 - [nicolas.galopin@g2elab.grenoble-inp.fr](mailto:nicolas.galopin@g2elab.grenoble-inp.fr)

**Comment postuler ?** Le la candidat-e est invité-e à envoyer un CV, les relevés de notes, une lettre de motivation (exposant clairement sa motivation pour ce projet) et d'éventuelles lettres de recommandation à l'encadrement. Un entretien pourra être organisé. Toutes les questions sont les bienvenues !

### Références

- [1] W. Eerenstein, et al. (2007). *Giant sharp and persistent converse magnetoelectric effects in multiferroic epitaxial heterostructures*. Nature Materials, 6(5) :348-351
- [2] Y. Zhou, et al. (2016). *Self-biased magnetoelectric composites : An overview and future perspectives*, Energy Harvesting and Systems, 3(1):1-42.
- [3] P. M. Reis, et al. (2015). *Designer matter : A perspective*, Extreme Mechanics Letters, 5:25-29.
- [4] Y. Yang, et al. (2023). *A new class of transformable kirigami metamaterials for reconfigurable electromagnetic systems*, Scientific Reports, 13(1):1219.
- [5] J. Yeo, et al. (2018). *Materials-by-design : computation, synthesis, and characterization from atoms to structures*, Physica Scripta, 93(5):053003.
- [6] L. Beirão Da Veiga, et al. (2013). *Basic principles of virtual element methods*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 23(01):199-214.
- [7] M. Mengolini, et al. (2019). *An engineering perspective to the virtual element method and its interplay with the standard finite element method*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 350:995-1023.
- [8] A. Urdaneta-Calzadilla, et al. (2023). *A FEM-BEM coupling strategy for the modeling of magnetoelectric effects in composite structures*, Engineering Analysis with Boundary Elements, 151:41-55.
- [9] J. Schröder. (2014). *A numerical two-scale homogenization scheme: the FE<sup>2</sup>-method*, in: Plasticity and Beyond, Springer, 1-64.
- [10] J. Schröder, et al. (2016). *Algorithmic two-scale transition for magneto-electro-mechanically coupled problems: FE<sup>2</sup>-scheme: Localization and homogenization*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 302:253-280.
- [11] J.M. Hestoffer, et al. (2023). *Graph neural networks for efficient learning of mechanical properties of polycrystals*, Computational Materials Science, 217, p. 111894.