

Sujet de thèse

Développement d'une méthode de classification supervisée pour l'identification des structures de joints de grains

Les propriétés mécaniques des matériaux polycristallins sont fortement conditionnées au comportement des joints de grains. Ces défauts bidimensionnels sont étudiés depuis longtemps mais leur complexité et le vaste espace des paramètres qui leur est associé en font un sujet d'étude à la frontière des connaissances actuelles. Une des difficultés principales à affronter pour étudier ces défauts par simulations atomistique est l'identification de la structure fine (aussi appelée complexion) des joints de grains présents dans le système. Le but de cette thèse est de développer une méthode de machine-learning et plus particulièrement de classification supervisée, pour identifier les structures des joints de grains dans les simulations atomistiques.

On se propose d'adapter une méthode de machine-learning appelée Steinhardt Gaussian Mixture Analysis (SGMA), récemment développée pour l'identification des défauts dans les cristaux complexes, à l'identification des complexions de joints de grains dans un cristal simple. Cette méthode consiste dans un premier temps à établir une base de données des structures à identifier. La seconde étape consiste à calculer pour chaque structure de la base de données, des descripteurs permettant de représenter les environnements atomiques locaux. Ces descripteurs sont enfin utilisés pour l'ajustement d'un modèle de mélange gaussien, permettant *in fine* de classifier les environnements atomiques locaux inconnus (voir figure).

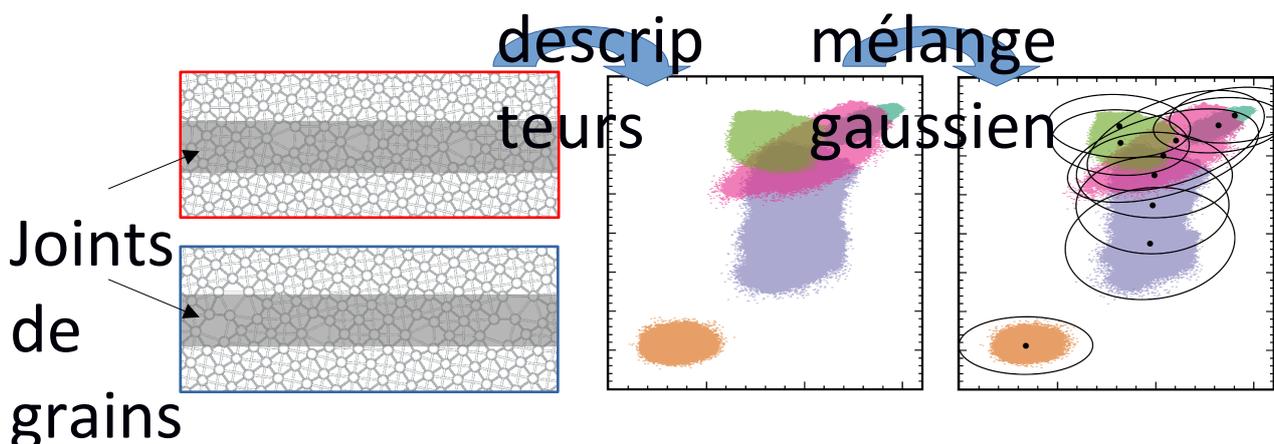


Figure : Illustration de la méthode SGMA, les structures atomiques des joints de grains sont encodées par des descripteurs qui sont ensuite ajustés par un modèle de mélange gaussien.

C'est sur la deuxième étape de la méthode que se concentrera initialement la thèse. En effet, avec le développement croissant des techniques de machine-learning pour la physique des matériaux, différents descripteurs ont vu le jour comme les descripteurs SOAP (Smooth Overlap of Atomic Positions) et ACE (Atomic Cluster Expansion). Ces descripteurs semblent plus prometteurs pour l'identification des complexions de joints de grains que les descripteurs initialement utilisés par la méthode SGMA. La thèse consistera dans un premier temps en l'implémentation des descripteurs SOAP et ACE dans le code AtomHIC (C++ orienté objet) contenant déjà les autres éléments nécessaires à la mise en place de la méthode SGMA. On testera ensuite l'applicabilité de la méthode à l'identification des complexions de joints de grains en se focalisant sur différentes complexions du joint de grains $\Sigma 3$ (joint de macles) dans l'or. Une des problématiques que cette méthode permettra d'aborder et sur laquelle on se penchera pendant cette thèse est l'établissement de relations entre les propriétés des joints de grains et leur vitesse de migration.

Profil souhaité

Une appétence pour la programmation est nécessaire pour mener à bien ce sujet de thèse. La curiosité scientifique, des qualités d'analyse, de synthèse, et de communication, sont également souhaitables.

Contacts :

Dr. Jean Furstoss

Jean.Furstoss@univ-poitiers.fr

Dr. Laurent Pizzagalli

Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr