

# Stage master (6 mois)

Le *Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux* (LEM3) est un centre de recherche transdisciplinaire expérimentale et théorique combinant la mécanique des solides et la métallurgie, la science des matériaux, la chimie et la physique. L'excellence scientifique mondiale du LEM3-Université de Lorraine a été reconnue en 2019 par le classement de Shanghai : 43<sup>ième</sup> en « *Metallurgical Engineering* » et 69<sup>ième</sup> en « *Mechanical Engineering* ». De plus, le LEM3 opte depuis de nombreuses années pour contribuer à la recherche sur les matériaux en développant de nouveaux dispositifs et nouvelles techniques de caractérisation des microstructures par microscopie électronique (A-ECCI et on-axis TKD).

Le *Laboratoire IOrrain de Recherche en Informatique et ses Applications* (LORIA) a pour mission la recherche fondamentale et appliquée en sciences informatiques. Ses thèmes de recherche sont les suivants : calculs, simulation et visualisation à haute performance ; qualité et sûreté des logiciels ; Systèmes parallèles, distribués et communicants ; modèles et algorithmes pour les sciences du vivant ; traitement automatique du langage naturel et communication multimodale, structures de traits ; représentation et gestion des connaissances. Enfin, le LORIA offre des infrastructures de calcul significatives, notamment grâce à des clusters spécifiques et surtout la plate-forme nationale GRID'5000, dédiée au calcul distribué et parallèle.

Nous proposons

## Stage M2 de 6 mois

**Exploration du potentiel de l'Intelligence Artificielle pour l'étude de la plasticité polycristalline.**

### Équipe du projet :

- LEM3 :
  - o Vincent TAUPIN
  - o Antoine GUITTON
  - o Julien GUÉNOLE
  
- LORIA :
  - o Amedeo NAPOLI
  - o Miguel COUCEIRO
  - o Adrien COULET

### Résumé du projet :

Nous souhaitons proposer une nouvelle méthodologie où on couple un code de plasticité cristalline avec une méthode de type *machine learning*, pour obtenir un système d'*Intelligence Artificielle* (IA) capable de suggérer des paramètres microstructuraux d'alliages métalliques (texture, orientations cristallines, type de joints de grains etc.) pour obtenir une propriété macroscopique souhaitée (limite élastique, durcissement, ductilité etc.). Le modèle de plasticité IA sera instruit à partir d'un ensemble de données expérimentales obtenues par microscopie électronique (diffraction d'électrons rétrodiffusés, imagerie par contraste de canalisation d'électrons), qui seront traduites en un système entrée (paramètres) / sortie (propriétés).

### Candidature :

Merci d'envoyer un CV, une lettre de motivation et vos notes du 1<sup>er</sup> semestre de M2 aux trois contacts ci-dessous :

**Vincent TAUPIN**  
vincent.taupin@univ-lorraine.fr

**Julien GUÉNOLE**  
julien.guenole@univ-lorraine.fr

**Antoine GUITTON**  
antoine.guitton@univ-lorraine.fr

# Stage master (6 mois)

## Objectifs du projet :

Le développement de nouveaux matériaux et la compréhension de leur déformation constituent le principal défi des chercheurs pour suivre et prévoir les évolutions rapides de notre société. Par exemple, dans un cadre de réduction des coûts énergétiques, l'augmentation des performances mécaniques des matériaux est conditionnée à l'amélioration constante des techniques expérimentales et théoriques conduisant à de nouvelles perspectives sur leurs mécanismes fondamentaux de déformation.

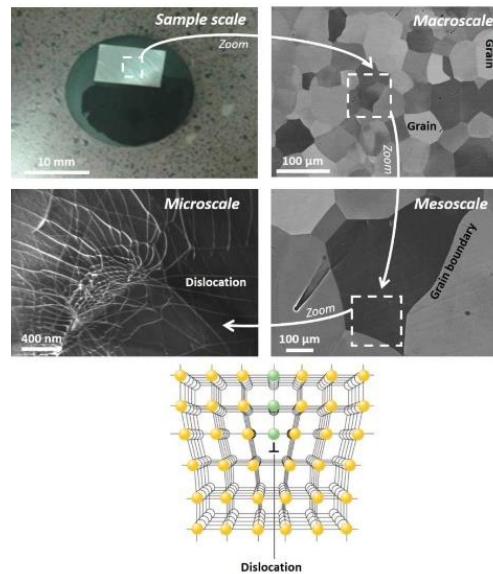


Figure 1 : une approche multi-échelles des matériaux.

Comme le montre la figure ci-dessus, la plupart des matériaux utilisés sont généralement polycristallins. Ils se composent de millions de monocristaux appelés grains. Les grains ont des orientations différentes et sont séparés des grains voisins par des interfaces appelées Joints de Grains (JdG). Il est bien établi que la déformation irréversible (ou plastique) d'un échantillon provient principalement de la nucléation et de la propagation de plus de centaines de milliards par  $\text{cm}^3$  de défauts linéaires micrométriques (voire nanométriques) du réseau cristallin appelés dislocations. Les dislocations traversent le grain et interagissent entre elles ou avec les JdG. Ces derniers peuvent agir de plusieurs manières : puits, pièges et sources de dislocations.

De nos jours, on sait presque comment une dislocation interagit avec un JdG modèle, mais comprendre la réponse de plusieurs JdG réels (contenus dans un véritable échantillon massif polycristallin) après avoir reçu de nombreuses dislocations est toujours un défi scientifique majeur. La difficulté devient inextricable quand on considère qu'il y a plus d'une centaine de milliards de dislocations par  $\text{cm}^3$  d'échantillon interagissant entre elles et avec des milliards de JdG... Encore plus inextricable si l'on veut prendre en compte l'influence de la distribution des JdG, des autres types d'interfaces, de la forme et de l'orientation des grains, c'est-à-dire sa microstructure. En raison de cette complexité inhérente, les scientifiques des matériaux doivent relier deux échelles extrêmes : l'échelle de l'échantillon (ou macro-) et l'échelle de la dislocation (ou micro-). Il est évident que ces deux mondes interagissent, mais leurs connexions restent extrêmement difficiles à comprendre.

Ainsi, il est évident que les mécanismes opérants ne peuvent pas être compris facilement et directement. Par conséquent, un modèle de substitution basé sur un algorithme de *machine learning* peut être développé à la place. Notons que dans cette approche, les mécanismes élémentaires de déformation ne sont pas supposés être connus, mais seul le comportement entrée-sortie est important.

**Dans ce projet très exploratoire, nous ambitionnons ainsi d'amorcer le couplage entre le *machine learning* et la plasticité polycristalline dans le but de proposer un modèle pouvant prédire la réponse mécanique des alliages métalliques en fonction de leurs paramètres microstructuraux. Expérimentalement, un ensemble de données expérimentales sera nécessaire pour vérifier/corriger la loi/les paramètres de comportement, de manière à devenir très prédictif et à être ensuite utilisé, à long terme, pour l'optimisation de la microstructure.**