

## **Développement de modèles d'apprentissage pour le système de détection de la Sonde Atomique Tomographique**

### **Description du laboratoire de recherche :**

Le Groupe de Physique des Matériaux est une Unité Mixte de Recherche entre l'Université de Rouen Normandie, l'INSA de Rouen Normandie et le CNRS. Nos activités scientifiques sont centrées sur l'étude des matériaux, et en particulier sur les relations entre leurs propriétés physiques et structurales. Grâce à une plateforme instrumentale de premier rang mondial, les analyses sont réalisées à toutes les échelles, jusqu'à la résolution atomique. Nous bénéficions par ailleurs d'une reconnaissance internationale pour notre expertise en instrumentation scientifique dédiée aux techniques d'analyse innovantes. Le GPM a de nombreux partenaires industriels et académiques, y compris à l'international.

### **Description de l'offre de stage :**

La SAT est un outil d'analyse qui permet de déterminer la structure et la composition locale de matériaux à l'échelle atomique. L'utilisation de cet outil d'analyse ne cesse de se démocratiser, depuis sa première commercialisation dans les années 1990, et a permis de contribuer à la résolution d'un grand nombre de problèmes en science des matériaux. Néanmoins, la technologie actuelle des systèmes de détection de SAT, associée à ses algorithmes de traitement de données, ne permet pas de réaliser des analyses quantitatives et/ou qualitatives dans toutes les situations (erreurs de localisation, pertes sélectives, rendement de détection insuffisant...). À ce jour, aucune métrique ne permet de contrôler et/ou résoudre l'ensemble de ces biais pour le large spectre de matériaux à analyser sur cet instrument.

L'utilisation d'algorithmes de Machine Learning, en apprentissage supervisé ou non-supervisé, permet aujourd'hui de réduire des incertitudes liées à l'utilisation de certains dispositifs scientifiques avec très peu de connaissances sur les lois physiques sous-jacentes [1, 2]. En prenant exemple sur ces algorithmes existants, il pourrait être envisageable d'améliorer la qualité des analyses en SAT et d'obtenir des critères de performances qui assureront la voie vers une démocratisation à plus grande échelle de cet instrument.

Pour aborder ces problématiques, ce sujet de stage a pour objectif, dans un premier temps, de développer un ou plusieurs modèles d'apprentissage qui serviront à prédire la position et la

nature chimique des atomes détectés en SAT. Dans une première partie, ce/ces premiers modèles devront être générés à partir de données simulées de SAT, puis pourront être testés sur des données expérimentales provenant d'une SAT réelle.

[1] Wei, Ye, et al. "Machine-learning-enhanced time-of-flight mass spectrometry analysis." *Patterns* 2.2 (2021).

[2] Broderick, Scott R., et al. "Data mining for isotope discrimination in atom probe tomography." *Ultramicroscopy* 132 (2013): 121-128.

## **Profil du candidat :**

Le candidat recherché doit préparer un diplôme de niveau BAC+5 (Master 2 ou École d'ingénieur) dans le domaine des sciences des données (data science), de la physique numérique ou des mathématiques appliquées. Des connaissances en sciences des matériaux seraient appréciés.

Vous êtes passionné par la recherche scientifique et technologique. Vous êtes organisé et êtes reconnu pour votre rigueur et votre capacité à travailler en équipe.

Vous possédez des compétences et un goût pour la programmation (Python, C/C++, Matlab). Vous avez des connaissances en statistiques, en physique et idéalement en machine learning.

## **Détails pour le stage :**

Lieu : Groupe de Physique des Matériaux (GPM), Avenue de l'Université, 76800 Saint-Étienne-du-Rouvray

Poursuite possible en thèse : Oui (Financement prévu pour octobre 2024)

Démarrage : Février 2024

## **Contact :**

Nom de l'encadrant : Christian Bacchi

E-mail : christian.bacchi1@univ-rouen.fr