

Titre : Représentation du désordre chimique dans les oxydes mixtes (U, Pu)O₂ en vue de son traitement par des méthodes d'apprentissage automatique

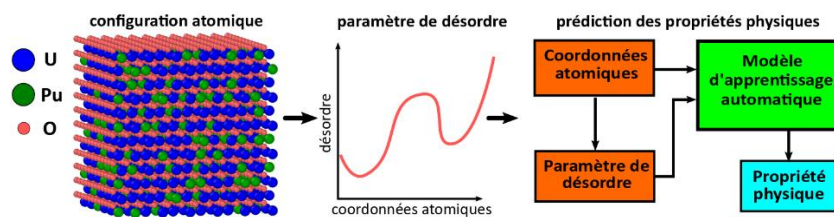
Domaines de spécialité :

Physique du solide, Simulations atomistiques, Mathématiques Appliquées, Méthodes d'apprentissage automatique

Contexte : (avec illustration)

L'application de méthodes d'apprentissage automatique dans la chimie des matériaux permet aujourd'hui de développer des modèles avancés permettant de déterminer les propriétés physico-chimiques de composés à complexité chimique élevée. Les oxydes mixtes (U,Pu)O₂, envisagés comme combustibles nucléaires du futur pour réduire la durée de stockage des déchets radioactifs, représentent un exemple de ces composés complexes. A l'échelle atomique, la distribution d'atomes U/Pu se rapproche de celle d'une solution solide parfaitement désordonnée, et de nombreuses propriétés, dont la connaissance est essentielle pour prédire le comportement en réacteur, dépendent du désordre chimique de façon peu connue.

L'étude de ces propriétés nécessite une exploration exhaustive (échantillonnage) de l'immense espace des possibles distributions de U/Pu dans le réseau cristallin, mais la tâche est ardue à cause de la relation fortement non-linéaire entre cette distribution et le paramètre de désordre, ce qui rend actuellement impossible la construction de configurations ayant un niveau de désordre préfixé. Des méthodes d'apprentissage automatique permettraient d'atteindre ce but en indiquant un jeu limité de configurations représentatives, ce qui assurerait une analyse efficace de toute propriété en fonction du désordre.



Objectifs :

Le stage vise la conception d'un nouveau paramètre de désordre décrivant la relation non-linéaire entre le désordre chimique et les coordonnées atomiques, dans le but de fournir un outil mathématique adaptée aux méthodes *machine learning* en vue du développement d'un modèle d'apprentissage ciblant la résolution du problème d'échantillonnage.

Étapes du stage :

En premier lieu, le stagiaire mènera une revue des méthodes de représentation du désordre actuellement disponibles, et des stratégies d'apprentissage automatique susceptibles de pouvoir résoudre le problème d'échantillonnage. Ensuite, il concevra un nouveau paramètre de désordre local prenant en compte l'environnement autour d'un défaut lacunaire, et il validera ce paramètre en analysant les données d'énergie de formation des défauts obtenues par des potentiels empiriques.

Relations/collaboration :

Collaboration avec l'équipe experte de méthodes d'intelligence artificielle du centre CEA de Saclay (Paris).

Moyens expérimentaux mis en œuvre (essais, techniques d'analyse, de caractérisation...) :

-

Moyens de calculs, informatiques mis en œuvre (langages, logiciels) :

Linux, Python, code de dynamique moléculaire LAMMPS, accès aux calculateurs du CEA et aux centres de calculs nationaux.

Mots-clés :

Désordre chimique, Intelligence Artificielle, Combustibles nucléaires, Plutonium, Oxydes mixtes

Durée :

4 à 6 mois

Lieu :

Direction des Energies, IRESNE, Département d'Etudes des Combustibles, Service d'Etudes et de Simulation du comportement des Combustibles, CEA Cadarache /13108 Saint-Paul lez Durance

Formation souhaitée :

Ecole d'Ingénieur ou Master Recherche en Mathématiques appliquées, Physique Numérique, Physique-Chimie du solide.

Possibilité de poursuivre en thèse :

Oui : Non :

Responsable/contact

Nom : MESSINA Prénom : Luca Email : luca.messina@cea.fr
Nom : BOURASSEAU Prénom : Emeric Email : emeric.bourasseau@cea.fr

Candidature à adresser 3 mois avant le début du stage au responsable

Consultation des stages CEA sur le site Internet: <http://portail.cea.fr/emploi>