

Création et implémentation d'un code Python pour l'analyse quantitative des propriétés mécaniques à la nanoéchelle de matériaux polymères basée sur des algorithmes de *Machine Learning*

Laboratoire de Physique des Nanomatériaux et Energie
Institut Matériaux

Philippe LECLERE
philippe.leclere@umons.ac.be

La connaissance des propriétés physiques et chimiques à la nanoéchelle des matériaux est essentielle afin de comprendre et d'ensuite prédire le comportement macroscopique de ceux-ci. Parmi les techniques de caractérisation expérimentale, les microscopies à sonde locale représentent une famille d'instruments de mesure de plus en plus pertinents.

De manière à établir une cartographie quantitative de ces propriétés, il est important d'enregistrer, pour chaque pixel de l'image, l'évolution de la force en fonction de la distance séparant la pointe du microscope et l'échantillon analysé. Il s'agit des courbes de force. Pour ce faire, nous aurons donc recours à des techniques récentes de microscopies à sonde locale (Peak Force Tapping, imAFM, Nano Dynamic Mechanical Analysis, ...) pour générer un ensemble de courbes de force sur une série de matériaux choisis comme modèles (films polymères, nanocomposites, hydrogels, ...). Les propriétés mécaniques (comme le module de rigidité, l'adhésion, la déformation, l'indentation) ou viscoélastiques (module de stockage, module de perte) sont ensuite obtenues grâce à l'utilisation de modèles théoriques décrivant le contact mécanique entre la pointe et l'échantillon. Les modèles existants (souvent complexes) sont généralement adaptés pour un type de matériau donné (polymère, céramique, ...).

Le mémoire proposé a pour but essentiel de produire un code (Python) qui permettra la création d'une interface graphique qui fournira, sur base d'une analyse des courbes de force et l'utilisation du modèle mécanique le plus approprié, les différentes cartographies. Au départ des données initiales, des algorithmes d'apprentissage (basé sur le *deep learning*) seront mis en œuvre, afin de minimiser l'intervention de l'utilisateur, en « triant » au préalable les courbes de force sur base de critères objectifs. Des méthodes de *data clustering* (comme le *K-means*, ou l'*Automated Gaussian Mixed Model*, ...) permettront par la suite de générer les différentes cartographies.

Le/la candidat.e devra posséder de bonnes connaissances en programmation (Python). Il/elle devra intégrer un ensemble de modules (déjà existants au laboratoire ou à créer) au sein du futur code. Il/elle interagira fortement avec les chercheurs qui effectueront les mesures expérimentales qui serviront à la validation du code.