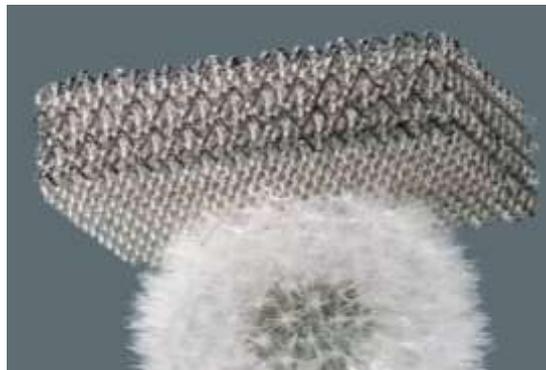


DESIGN BY AI OF OPTIMAL ARCHITECTURES FOR NOVEL ULTRALIGHT METAMATERIALS, RESISTANT TO BOTH FRACTURE AND DEFORMATION

CEA Saclay – Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC) ([web](#))

CEA Saclay – Nanosciences et Innovation pour les Matériaux la Biomédecine et l'Énergie (NIMBE) ([web](#))

The quest toward high-performance materials combining lightness and mechanical strength gave rise to a flurry of activity: desire to reduce CO₂ emissions and develop fuel-efficient vehicles in the transport industries for instance. A promising solution in this context is to replace solid materials by cellular materials of well-chosen architecture, manufactured via 3D printing. Significant progress has been made recently: microlattices formed by hollow metal tubes arranged periodically into octahedron cells can have densities comparable to those of aerogels, but rigidities more than 1000 times higher! The rules that dictate stiffness for such periodic architectures are now well understood: They are fixed by Maxwell's criterion and the connectivity of the lattice (number of struts per node). Conversely, these periodic microlattices have the drawback of being mechanically anisotropic at the macroscopic scale: they are softer, more brittle, and more prone to damage, when stressed along certain preferred directions.



Microlattice developed by Caltech & HRL Laboratories

Inspired by the observation of natural architectural materials (bone structure, alveolar structure of bark...) we will seek to develop disordered architectures in order to obtain a new class of metamaterials/microlattices that are ultralight, mechanically resistant (to deformation and fracture), while remaining fully isotropic. We will use artificial intelligence (AI) tools to elucidate the optimization rules to follow, without presupposing them. This PhD project is mainly numerical and theoretical, but will be conducted in close collaboration with experimentalists.

The first step will be to implement an AI algorithm to predict density, elasticity, fracture resistance and compressive strength as a function of the input architecture geometry, via tools to be defined: cost function and associated weights, gradient descent for minimization, neural network, etc... The second step will be to define optimal architectures in terms of mechanical stiffness, crack resistance and compressive strength under prescribed constraints in terms of density and architecture isotropy. Finally, the architectures obtained will be qualified through fracture and compression experiments carried out on microlattice samples obtained by additive manufacturing with different materials (polymers, composites, and even ceramics or metallic alloys).

This Ph.D. thesis takes place astride statistical physics, AI, mechanics and materials science. The candidate will have the opportunity to use, - and to familiarize himself with -, both the theoretical and experimental techniques developed in these three fields. This PhD topic, combining both fundamental aspects and potential industrial applications, will permit the candidate to find job openings either in the academic field or in industry.

Host laboratory: Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC) at CEA Saclay (Centre de l'Orme des Merisiers) located 25 km South of Paris, France. This research project will be led in collaboration with the NIMBE laboratory at CEA-Saclay and the Pole Universitaire Leonard de Vinci (France).

Candidate profile: Physicist and/or engineer student highly motivated by the topic. It requires a taste for teamwork, a strong scientific curiosity and an open mind. It also requires a taste for programming (Python in particular). A candidate with a first experience in AI would be appreciated

Funding: This PhD has been identified as « front-page PhD topic » by CEA. **CEA has secured PhD funding** for the candidate who will be selected on this subject (3-years contract, monthly gross salary: 2135€).

Application dead-line : Friday, the 15th of April, 2022,

Application procedure: send detailed CV and recommendation letters or references to: Daniel Bonamy, +33 1 69 08 21 14, daniel.bonamy@cea.fr ([web](#)) and Patrick Guénoun, patrick.guenoun@cea.fr

DESIGN PAR IA D'ARCHITECTURES OPTIMALES POUR METAMATERIAUX ULTRA-LEGERS ET RESISTANTS A LA RUPTURE ET DEFORMATION

CEA Saclay – Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC) ([web](#))

CEA Saclay – Nanosciences et Innovation pour les Matériaux la Biomédecine et l'Énergie (NIMBE) ([web](#))

La recherche de matériaux combinant légèreté et résistance mécanique est un domaine en plein essor, tiré, dans le domaine du transport notamment par la volonté de réduire les émissions de CO₂ et de développer des véhicules économes en carburant. Une des solutions consiste à remplacer les matériaux massifs par des microtreillis d'architecture judicieusement choisie, fabriqués par impression 3D. Des progrès importants ont été accomplis récemment : des microtreillis formés de tubes métalliques creux arrangés périodiquement en octaèdres peuvent présenter des densités comparables à celles des aérogels, mais des rigidités plus de 1000 fois supérieures ! Les règles à suivre pour maximiser cette rigidité dans ces architectures périodiques sont maintenant bien connues et fixées par le critère de Maxwell et la connectivité du réseau (nombre d'entretoises par nœud). En revanche, ces microtreillis périodiques présentent à l'échelle macroscopique un comportement mécanique anisotrope : ils sont plus mous, plus cassants, et plus sujets aux dommages, lorsqu'ils sont sollicités suivant certaines directions.



Inspirés par l'observation de matériaux architecturés naturels (structure osseuse, structure alvéolaire des écorces...) nous chercherons ici à développer des architectures désordonnées en vue d'obtenir une nouvelle classe de métamatériaux / microtreillis qui soient ultralégers & mécaniquement résistants (à la déformation et à la rupture), tout en restant isotropes. Nous utiliserons pour cela les outils de l'intelligence artificielle (IA) pour élucider les règles d'optimisation à suivre, sans présupposer celles-ci. Ce projet de thèse est principalement numérique et théorique, mais sera mené en partenariat étroit avec des expérimentateurs.

Il s'agira d'abord de mettre en place un algorithme IA permettant de prédire densité, élasticité, résistance à rupture et résistance à compression en fonction de l'architecture d'entrée à l'aide d'outils à définir : fonction de coût et poids associés, descente de gradient pour la minimisation, réseau de neurones, etc... Il s'agira ensuite de définir des architectures optimales en termes de rigidité mécanique, résistance à la fissuration et résistance à la compression sous contrainte de conditions de densité et d'isotropie mécanique. Il s'agira finalement de qualifier les architectures obtenues au travers d'expériences de fracture ou compression menées sur des microtreillis obtenus par impression 3D de différents matériaux (polymère, composite, voire céramique ou métallique).

Le sujet de thèse met en jeu des notions appartenant à la fois à l'algorithmique et l'IA, l'ingénierie mécanique, la physique statistique et la science des matériaux. Le candidat aura donc l'opportunité de manipuler les outils utilisés dans ces différents domaines. Le caractère à la fois très fondamental et appliqué de cette recherche lui permettra de trouver à l'issue de la thèse des débouchés dans le monde académique et dans l'industrie.

Laboratoire d'accueil : Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC) du CEA Saclay, situé sur le centre de l'Orme des Merisiers, 91191 Gif sur Yvette, France. Ce projet de recherche sera mené en collaboration avec le laboratoire NIMBE du CEA Saclay et le Pole Universitaire Leonard de Vinci (France).

Profil recherché : Etudiant en physique ou en ingénierie fortement motivé par le sujet. Il nécessite un goût du travail en équipe, une importante curiosité scientifique et un esprit d'ouverture. Un goût prononcé pour la programmation (Python en particulier) est aussi nécessaire. Un candidat ayant eu une première expérience en IA serait fortement apprécié.

Financement : Ce sujet de thèse fait partie des sujets identifiés comme « sujets phares » par le CEA. **Le CEA a réservé un financement garanti** pour le candidat qui sera retenu (CDD 3 ans, rémunération brut mensuelle : 2135€).

Date limite de candidature : vendredi 15 avril 2022,

Procédure de candidature : envoyer CV détaillé et lettres de recommandation ou références à : Daniel Bonamy, +33 1 69 08 21 14, daniel.bonamy@cea.fr ([web](#)) et Patrick Guénoun, patrick.guenoun@cea.fr