

Proposition de thèse de doctorat intitulée : *Nouvelle génération de modèles thermodynamiques de solutions solides pour la simulation d'évolutions microstructurales de matériaux métalliques*

Endroit : École Polytechnique de Montréal (Canada)

Support financier : Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada

Début : Le plus rapidement possible; **Durée de financement :** 4 ans

Montant du financement : 24 000\$ brut /an

But de la thèse proposée : Avec l'appui financier du Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada, je suis à la recherche d'un candidat aux études doctorales pour travailler dans mon équipe de recherche à la création d'une nouvelle génération de modèles thermodynamique de solutions solides pour la simulation d'évolutions microstructurales de matériaux métalliques [nécessitant l'utilisation/l'implémentation d'une méthode de minimisation sous contrainte efficace et adaptée à ce genre de problème.](#)

Problématique : Les modèles thermodynamiques actuels décrivant le comportement énergétique des solutions n'ont que très peu évolué au cours des dernières décennies. Les modèles de type sous-réguliers sont très souvent utilisés pour décrire le comportement énergétique des solutions liquides alors le *Compound Energy Formalism* est généralement paramétré de manière à définir le comportement des solutions solides. Ces modèles empiriques hautement flexibles de par l'ajout de paramètres en excès permettent certes de reproduire simultanément plusieurs données expérimentales, mais ne sont pas très efficaces lorsque l'on souhaite interpoler/extrapoler le comportement des solutions dans des conditions d'équilibres inexplorées expérimentalement.

Objectifs à atteindre à la fin de la thèse : L'objectif principal du présent projet d'études doctorales est de construire la nouvelle génération de modèles thermodynamiques de solutions en s'appuyant sur les connaissances de la physique statistique (entropie configurationnelle), de la physique de la matière condensée solide (ordonnancement chimique à courte et longue distance, harmonicité) et au besoin de la mécanique quantique (dans la description de l'énergie interne) afin de fournir à la communauté scientifique un outil prédictif puissant. [Ces nouveaux modèles thermodynamiques seront développés de concert avec une méthode de minimisation sous contraintes de fonctions non-linéaires continues robuste et fiable nécessaire à l'obtention de l'état d'équilibre du système.](#)

À terme ce projet permettra de paramétrer un modèle thermodynamique robuste où chaque paramètre aura un sens physique. Un tel outil est jugé essentiel dans le contexte scientifique actuel où l'on souhaite modéliser numériquement le comportement des matériaux métalliques multiphasiques élaborés dans des conditions hors équilibre. En effet, les gradients de potentiels chimiques à l'intérieur du système considéré représentent la force motrice de cette évolution microstructurale. Le projet aura donc des répercussions importantes en ingénierie également.

Compétences scientifiques requises : Le candidat doit tout d'abord détenir un diplôme universitaire en science des matériaux, en physique, en chimie ou en mathématiques appliquées. Par ailleurs, le candidat devra exceller en informatique dans les domaines suivants : programmation par objet (C++) et compilation sous environnement Windows et Unix, utilisation de libraires mathématiques permettant le calcul vectoriel et matriciel de base (ex. : MKL de Intel), libraires OPENMP, MPI, etc.

Remarque : Les français sont assujettis aux mêmes frais de scolarité que les étudiants québécois (~1500 \$/an)

Jean-Philippe Harvey, professeur adjoint

Département de génie chimique

École Polytechnique de Montréal, Canada

Jean-philippe.harvey@polymtl.ca