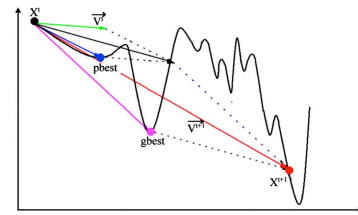


Sujet de thèse : Recherche de nouvelles structures cristallines par optimisation globale pour le stockage électrochimique de l'énergie.

Mots clés : théorie de la fonctionnelle de la densité, algorithme d'optimisation globale, matériaux pour l'énergie

L'objectif de ce projet de thèse est de mettre au point un programme informatique permettant de trouver de nouvelles structures cristallines de matériaux à propriétés spécifiques. Les matériaux d'intérêt seront des électrolytes pour les batteries tout solide sodium-ion.

L'algorithme que le doctorant implémentera est basé sur l'optimisation globale de structures permettant de trouver, pour une composition chimique donnée, la structure la plus stable et possédant la propriété recherchée. Parmi les algorithmes permettant cette optimisation globale de structures *l'optimisation par essaim particulière* (PSO, particle swarm optimization) a été choisie du fait de sa simplicité et de sa robustesse. Cette méthode repose sur le lien social entre les individus, ici les atomes constituant les structures, qui leur permet de s'adapter afin de trouver l'état global le plus favorable, dans notre cas la plus grande stabilité couplée à la propriété recherchée. Le cœur de l'algorithme repose sur l'équation suivante :



$$v_{i,j}(t+1) = \omega v_{i,j}(t) + c_1 r_1 (pbest_{i,j}(t) - x_{i,j}(t)) + c_2 r_2 (gbest_{i,j}(t) - x_{i,j}(t))$$

dans laquelle le premier terme est un terme d'inertie incitant la particule à conserver sa direction initiale, le second est un terme cognitif qui prend en compte la meilleure position $pbest(t)$ de la particule et le troisième est un terme social qui prend en compte la meilleure position $gbest(t)$ acquise par une particule du groupe. ω , c_1 , c_2 sont des constantes, r_1, r_2 sont des nombres aléatoires et $x(t)$ est la position de la particule à l'instant t . La position de la particule à l'instant $t+1$ s'écrit : $x_{i,j}(t+1) = x_{i,j}(t) + v_{i,j}(t+1)$. L'équation d'évolution est schématisée sur la figure ci-dessus.

Une première phase d'environ 18 mois consistera à implémenter l'algorithme dans le programme. La seconde phase sera consacrée à l'utilisation du programme pour découvrir de nouvelles structures d'électrolytes pour batterie. Le projet sera développé en collaboration entre les laboratoires MADIREL et IM2NP de l'Université d'Aix-Marseille, sous la direction conjointe de Pr. Pascal Boulet et Pr. Marie-Christine Record.

Personnes à contacter : pascal.boulet@univ-amu.fr, m-c.record@univ-amu.fr