

Sujet de stage M1 Géosciences & Machine Learning :

EBSD & indexation dictionnaire / EBSD & Dictionary Indexing

La détermination des orientations des cristaux dans un alliage métallique, une céramique ou une roche naturelle est de première importance pour la détermination des propriétés mécaniques du matériau considéré. Aujourd'hui ces orientations peuvent être cartées avec une résolution inframicrométrique grâce à la méthode EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction, réfraction des électrons rétrodiffusés) mise en œuvre sur un microscope électronique à balayage. Les figures de diffraction dessinent en effet un réseau de bandes sur le détecteur (bandes de Kikuchi) dont la géométrie est à la fois dépendante de la nature du minéral et de l'orientation de ses axes cristallographiques. Les logiciels constructeurs procèdent à une indexation en temps réel par une analyse d'image rapide (une transformée de Hough) mais souvent décevante en termes de résultats pour les silicates naturels.

Le but de ce stage est d'explorer la possibilité d'utiliser une méthode basée sur la comparaison systématique des motifs de Kikuchi avec un dictionnaire d'images synthétiques produites à partir d'un modèle direct du réseau cristallin des minéraux d'intérêt et la configuration du système de mesure. Des études récentes montrent que cette méthode aboutit à des taux d'indexation meilleurs que les traitements d'image usuels, et qu'elle produit même une donnée plus riche que la simple orientation des axes cristallographiques. Des logiciels libres et open source (EMSoft, AstroEBSD et Kikuchipy, notamment) permettent de générer le dictionnaire et de procéder à son exploration.

La démarche envisagée est phasée en deux temps. Il s'agit d'abord de prendre en main les outils existants et les tester sur des données types à acquérir sur des minéraux de haut niveau de symétrie, puis de s'intéresser aux méthodes utilisées pour l'exploration du dictionnaire et à leurs éventuelles sophistications. Ce champ de développement est en fait un sujet d'actualité en sciences des matériaux, les données EBSD étant un terrain de jeu « facile » pour les méthodes de machine learning. L'utilisation de dictionnaires successifs de résolution croissante, le raffinement de la métrique utilisée, la combinaison d'autres méthodes récemment développées, comme la décomposition du motif de Kikuchi en harmoniques sphériques ou le débruitage par analyse en composantes principales, sont autant de pistes possibles de développement.

L'ISTeP possède les capacités d'analyse et les moyens de calcul suffisants pour les phases de test. Les infrastructures de calcul plus puissantes de SU seront éventuellement mobilisées si nécessaire. L'intérêt de ce projet est collectif, car de nombreux collègues et doctorants sont limités dans leur réflexion par la qualité des mesures EBSD. Le ou la stagiaire intéressée aura donc de nombreuses opportunités d'interactions dans le laboratoire.

Determining the orientations of crystals in a metal alloy, a ceramic or a natural rock is of primary interest for evaluating the mechanical properties of the material. Today these orientations can be mapped with sub-micrometric resolution using the EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction) method implemented on a scanning electron microscope. The diffraction patterns indeed draw a network of bands on the detector (Kikuchi bands) whose geometry is both dependent on the nature of the mineral and the orientation of its lattice planes. Built-in software carries out real-time indexing during analysis using rapid image processing (a Hough transform) but is often disappointing in terms of results for natural silicates.

The aim of this internship is to explore the possibility of using a method based on the systematic comparison of Kikuchi patterns with a dictionary of synthetic images produced from a direct model of the crystal lattice of minerals of interest and the precise configuration of the measurement system. Recent studies show that this method results in better indexing rates than usual image processing, and that it even produces richer data than the simple orientation of the crystallographic axes. Free and open source softwares (EMSoft, AstroEBSD and Kikuchipy, in particular) make it possible to generate the dictionary and carry out its exploration.

The envisaged approach is phased in two stages: First implementing the existing tools and testing them on typical data to be acquired on minerals with a high level of symmetry, then focusing

on the methods used for the exploration of the dictionary and their possible sophistication. This field of development is actually a hot topic in materials sciences, with EBSD data being an “easy” playground for machine learning methods. The use of successive dictionaries of increasing resolution, the refinement of the metric used, the combination of other recently developed methods, such as the decomposition of the Kikuchi pattern into spherical harmonics or denoising by principal component analysis, are all possible avenues for development.

ISTeP has sufficient analysis capabilities and calculation resources for the test phases. SU's more powerful computing infrastructures will eventually be mobilized if necessary. The interest of this project is collective, because many colleagues and doctoral students projects are limited by the actual quality of EBSD measurements. The interested trainee will therefore have numerous opportunities for interaction in the laboratory.

Encadrement :

Loïc Labrousse, ISTeP

Omar Boudouma, IR Caractérisation des Minéraux, ISTeP

Dominique Béréziat & Isabelle Bloch, LIP6

Références choisies :

Ånes, H. W., Hjelen, J., Sørensen, B. E., Van Helvoort, A. T. J., & Marthinsen, K. (2020, July). Processing and indexing of electron backscatter patterns using open-source software. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 891, No. 1, p. 012002). IOP Publishing.

Ding, Z., Pascal, E., & De Graef, M. (2020). Indexing of electron back-scatter diffraction patterns using a convolutional neural network. *Acta Materialia*, 199, 370-382

Kaufmann, K., Lane, H., Liu, X., & Vecchio, K. S. (2021). Efficient few-shot machine learning for classification of EBSD patterns. *Scientific reports*, 11(1), 8172.

Marquardt, K., De Graef, M., Singh, S., Marquardt, H., Rosenthal, A., & Koizumi, S. (2017). Quantitative electron backscatter diffraction (EBSD) data analyses using the dictionary indexing (DI) approach: Overcoming indexing difficulties on geological materials. *American Mineralogist*, 102(9), 1843-1855.