

Magnétisme par apprentissage automatique (machine learning)

Cadre général : Prédire de nouveaux matériaux magnétiques avec des propriétés spécifiques nécessite d'explorer de nombreux systèmes et si possible l'ensemble des composés possibles dans une famille de matériaux. Pour parvenir à cette fin, il est nécessaire de pouvoir évaluer les interactions magnétiques d'un composé en un temps très faible, au vol dans un calcul d'exploration de structures. Malheureusement le calcul de ces interactions nécessite l'utilisation de procédures coûteuses tant en temps humain qu'en temps de calcul. Il est donc nécessaire de changer de paradigme et d'utiliser des méthodes non-heuristiques comme les méthodes d'apprentissage automatique. En effet, le faible coût de calcul de ces méthodes, une fois la machine entraînée, permettent d'envisager de relever le défi de l'exploration automatique d'un ensemble de possibles.

Dans le domaine des matériaux magnétiques, les méthodes d'apprentissage automatique sont cependant très peu utilisées et essentiellement focalisées sur la détermination de températures de transition et de diagrammes de phases.

Sujet exact, moyens disponibles : Dans ce projet nous proposons d'explorer ce nouveau champ de la science et d'élaborer une méthode d'apprentissage automatique pour prédire les propriétés magnétiques de réseaux organométalliques (MOF). L'objet est d'explorer les méthodes d'apprentissage automatique pour déterminer quelles sont les meilleures pour notre problème, de déterminer les descripteurs nécessaires pour décrire les interactions magnétiques, de construire une base données pour l'apprentissage. De ce point de vue, dans un premier temps il s'agira tout d'abord de collecter les données de travaux antérieurs du groupe, puis de les augmenter et de ne produire de nouvelles données que si nécessaire.

Le travail sera réalisé sur les supercalculateurs nationaux ou régionaux, le responsable s'assurant de la disponibilités de ces dernières.

Interactions et collaborations éventuelles : Ce travail sera réalisé en collaboration étroite avec Jean-Luc Parouty (SIMAP), spécialiste en intelligence artificielle. L'étudiant(e) sera de plus amené(e) à collaborer avec des théoriciens spécialistes de la recherche de structures par algorithme évolutionnaire (Gilles Frapper and F. Guégan de l'IC2MP), de la diffraction de neutrons (Elisa Rebolini de l'ILL), et avec les groupes expérimentaux travaillant sur le sujet.

Ce stage pourra se poursuivre par une thèse : oui

Formation / Compétences : Un bon niveau en mécanique quantique sera requis, ainsi que des connaissances de base en programmation python et en utilisation du système opératif linux. Des connaissances en apprentissage automatique et en magnétisme seront appréciées.

Période envisagée pour le début du stage : entre février et avril 2023

Contact : LEPETIT Marie-Bernadette

Institut Néel - CNRS

tél : +33 4 76 88 90 45

mel: Marie-Bernadette.Lepetit@neel.cnrs.fr

Plus d'informations sur : <http://neel.cnrs.fr>