

PROPOSITION DE STAGE 2020-2021

Laboratoire d'accueil :

Institut de Chimie et des Matériaux (Paris-Est, Thiais)
LPSM (Sorbonne Université, Paris)
Nutriomics (Sorbonne Université, Paris)

Responsables de stage :

Jean-Claude Crivello (crivello@icmpe.cnrs.fr)
Tabea Rebafka (tabea.rebafka@sorbonne-universite.fr)
Nataliya Sokolovska (nataliya.sokolovska@sorbonne-universite.fr)

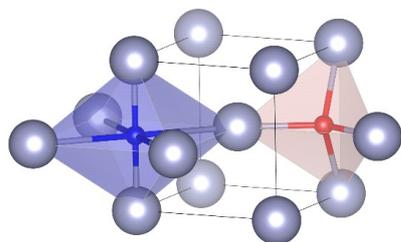
Titre :

Génération de mailles cristallographiques pour le stockage d'énergie par apprentissage statistique

Description du sujet de stage :

Dans ce projet de recherche interdisciplinaire (science des matériaux / mathématique), nous explorerons la découverte de nouvelles structures cristallographiques en appliquant les méthodes d'apprentissage automatique afin de concevoir des matériaux innovants et efficaces pour le domaine de l'énergie (e.g. hydrures métalliques). Ces composés chimiques sont typiques de matériaux pour lesquels, la recherche incrémentale ayant montré ses limites, un vrai changement peut s'opérer grâce à des approches innovantes, comme la prédiction et la génération par apprentissage statistique.

Tout d'abord, une base de données d'apprentissage sera créée avec des descripteurs correspondant aux propriétés des matériaux. Un effort sera nécessaire pour décrire correctement l'objet topologique de la maille cristallographique en prenant en compte l'environnement atomique de la liaison chimique (théorie des graphes, diagramme de Voronoï,...). Enfin, des algorithmes génératifs (e.g. GAN) seront à développer afin de prédire de nouveaux matériaux innovants.



Représentation tridimensionnelle d'un hydrure cubique centré où l'atome d'hydrogène H est localisé sur un site interstitiel d'une matrice métallique.

References :

A. Noura, N. Sokolovska, J.-C. Crivello, AAI Spring Symposium: Combining Machine Learning with Knowledge Engineering, Stanford, 2019, <https://arxiv.org/abs/1810.11203>
A. Atamna, N. Sokolovska, J.-C. Crivello, IDA Symposium on Intelligent Data Analysis, Konstanz, 2020, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02378826v1>

Profil recherché :

- de très bonnes connaissances en machine learning
- des connaissances en analyse des graphes
- de fortes compétences en programmation
- une expérience en modélisation des données
- un grand intérêt pour la science des matériaux

Période prévue pour le stage : printemps 2021 (5 mois)

Financement prévu pour le stage : gratification mensuelle (~550€)

Débouché en thèse possible