

# INSTITUT NEEL Grenoble

PhD subject – 2023-2026

(English version below)

## **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'objectif 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.

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

**Interactions et collaborations éventuelles :** Ce travail sera réalisé en collaboration étroite avec Jean-Luc Parouty et A. Mbogol Touyé (SIMAP), spécialistes 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), et des expérimentateurs synthétisant et étudiant les réseaux organométalliques auxquels nous souhaitons appliquer la méthode développée (D. Luneau, S. Kodidjan, H. Klein).

**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.

**Candidature en ligne sur ;**

**<https://emploi.cnrs.fr/Offres/Doctorant/UPR2940-ELOBER-081/Default.aspx>**

**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>

(version française ci-dessus)

**Magnetism by machine learning**

**General Scope :** In order to predict new magnetic materials with desired properties one needs to be able to scan large number of systems and if possible the whole set of possibilities in a given family of materials. To reach this goal one need to evaluate on-the-fly the magnetic interactions of any given system. The accurate calculation of the latter however presently requires time-consuming procedures. One thus need to change the methodology and use a non-heuristic approach such as machine learning methods. The low computational cost of these new "in silico" methods offers a way to meet the challenge of an "automated" exploration of the field of possibilities.

In the field of magnetic materials, the use of deep learning methods is however quite uncommon and essentially focused on the determination of transition temperature, or phase diagrams and not on the determination of the magnetic interactions.

**Research topic and facilities available :** In this project, we propose to explore this new field by elaborating a machine learning methodology to predict the magnetic properties of metal-organic-frameworks (MOF). The project will explore the best type of deep learning method to be used, the structural or electronic descriptors needed to predict the magnetic interactions, the construction of the training data sets.

This work will be done on French supercomputer facilities. The supervisor will provide the computer hours allocation.

**Possible collaboration and networking :** This work will be done in close collaboration with a machine learning specialist :Jean-Luc Parouty and A. Mbogol Touyé from SIMAP. The student will also be in contact with other theoreticians specialist of evolutionary algorithms (Gilles Frapper and F. Guégan from IC2MP) and experimentalists groups working on the magnetic MOFs to which we plan to applied the developed method (D. Luneau, S. Kodidjan, H. Klein).

**Required skills:** A good knowledge of quantum mechanics is required as well as basic knowledge of python and linux operating system. Some knowledge on machine learning and magnetism will be appreciated.

**Online application on :**

<https://emploi.cnrs.fr/Offres/Doctorant/UPR2940-ELOBER-081/Default.aspx>

**Contact :**

Name : LEPETIT Marie-Bernadette

Institut Néel - CNRS

Phone : +33 4 76 88 90 45

e-mail : Marie-Bernadette.Lepetit@neel.cnrs.fr

More information : <http://neel.cnrs.fr>