

Magnetism by machine learning

General Scope : In order to predict new magnetic materials with desired properties one needs to be able to scan a large number of systems and if possible the whole set of possibilities in a given family of materials. To reach this goal one needs 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 needs 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. The latter will be first developed by collecting data from previous work of the group, then by extending them and producing new data.

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 from SIMAP. The student will also be in contact with other theoreticians specialist of evolutionary algorithms (Gilles Frapper and F. Guégan from IC2MP) or neutrons scattering (Elisa Rebolini from ILL) and experimentalists groups working on magnetic MOFs.

Possible extension as a PhD : yes

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.

Starting date : Anytime between february and april 2023

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>

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 disponibilité 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>