

Avis de Soutenance

Madame Astrid KLIPFEL

Mathématiques

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Equivariant Message-Passing Neural Networks Equivariants et Modèles de Diffusion Probabilistes pour la Science des Matériaux

dirigés par Monsieur Yael FREGIER et Monsieur Adlane SAYEDE

Soutenance prévue le **vendredi 22 décembre 2023** à 15h00

Lieu : Faculté des sciences Jean Perrin Rue Jean Souvraz 62300 Lens

Salle : S25

Composition du jury proposé

M. Yael FREGIER	Université d'Artois	Directeur de thèse
M. Adlane SAYEDE	Université d'Artois	Co-directeur de thèse
Mme Houria KABBOUR	Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel	Examinatrice
M. Steven SCHOCKAERT	Cardiff University	Rapporteur
Mme Céline HUDELLOT	CentraleSupélec	Rapporteuse
M. Nicolas WICKER	Université de Lille	Examineur
M. Zied BOURAOUI	Université d'Artois	Invité

Résumé :

L'hydrogène pourrait être une alternative plus propre aux énergies plus émettrices de gaz à effet de serre. Toutefois, pour réduire efficacement les émissions de gaz à effet de serre, il est nécessaire de mettre en place les infrastructures permettant de produire de l'hydrogène tout en réduisant leurs émissions. Une solution potentielle pourrait être la production d'hydrogène solaire car elle permet d'obtenir de l'hydrogène avec des émissions de gaz à effet de serre considérablement réduites. Toutefois, ce processus nécessite le développement de nouveaux matériaux semi-conducteurs dotés de propriétés photocatalytiques. Il pourrait être possible d'utiliser des méthodes permettant la découverte de nouveaux matériaux en les appliquant au cas de la recherche de nouveaux semi-conducteurs pour la production d'hydrogène par électrolyse de l'eau. Ces méthodes de recherche de nouveaux matériaux emploie diverses stratégies principalement basées sur la simulation ou l'apprentissage automatique qu'il serait possible d'explorer. Alors que la grande majorité de ces méthodes se sont avérées efficaces en chimie organique, en particulier celles basées sur les réseaux neuronaux à passage de messages, on ne sait toujours pas dans quelle mesure où de quelle manière les réseaux neuronaux à passage de messages peuvent être adaptés à la production de matériaux cristallins tels que les semi-conducteurs. Cette thèse propose une architecture équivariante inspirée par la physique de réseaux neuronaux à passage de messages pour les matériaux cristallins basés sur des champs vectoriels. Nous utilisons ces MPNN pour générer des modèles à travers un processus de diffusion, résultant en des structures qui ressemblent à celles trouvées dans une base de données de matériaux cristallins. Ces modèles générés peuvent être utiles dans les pipelines de criblage à haut débit. Ils peuvent aider à sélectionner de nouveaux matériaux présentant les caractéristiques requises pour la production d'hydrogène solaire.