

Découvrir de nouveaux hydrures métalliques par l'apprentissage automatisé

Jean-Claude CRIVELLO¹, Asma ATAMNA^{1,2}, Asma NOUIRA^{1,2}, Nataliya SOKOLVSKA²

¹ ICMPE UMR7182, UPEC CNRS, Thiais

² Sorbonne Université, INSERM, NutriOmics Team, Paris

Résumé :

L'utilisation d'hydrures métalliques, dans lesquels l'atome d'hydrogène est inséré dans une matrice métallique, est une voie prometteuse pour le stockage d'énergie, mais la recherche sur ces matériaux nécessite la découverte de nouveaux composés compétitifs. Pour répondre à cette problématique l'utilisation de deux méthodes couplées semble séduisante : Le criblage par calcul DFT et l'apprentissage automatisé.

Dans cette présentation, nous détaillerons la seconde approche, celle du *machine learning*. Avant tout, cette technique nécessite une base de données d'apprentissage qui a été construite de façon à contenir des données d'entrée géométriques et énergétiques d'hydrures. La base a été alimentée à partir des données de criblage par DFT obtenues dans une étude antérieur [1]. Différents algorithmes d'apprentissage de cette base ont été testés, dans lesquels un accent a été mis sur les approches génératives, de type GAN [2] pour la prédiction de sortie structurée avec pour défi la génération, l'évaluation et la validation des nouvelles structures cristallographiques [3]. Pour mener à bien cette approche émergente, différentes méthodes connues de l'état de l'art de l'apprentissage profond (*deep learning*) ont été proposées et appliquées (Fig. 1). Des résultats préliminaires encourageants seront présentés.

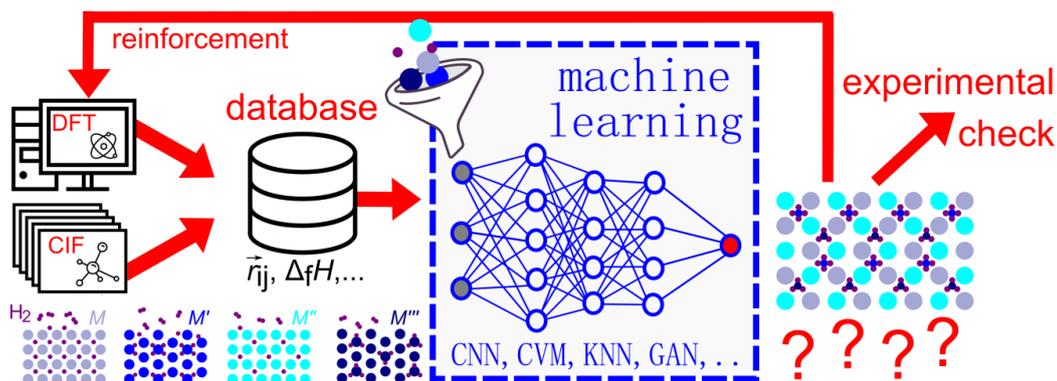


Fig. 1. Proposition d'un algorithme d'apprentissage par renforcement pour produire de nouveaux hydrures métalliques.

[1] N. Bourgeois, J.-C. Crivello, P. Cenedese et J.-M. Joubert. ACS Combinatorial Science (2017), 19(8), pp 513-523

[2] I. Goodfellow *et al.*, Proceeding in NIPS (2014), 2672-2680

[3] A. Nouira, N. Sokolovska et J.-C. Crivello, ArXiv (2018), arXiv:1810.11203