

FICHE DE POSTE / Intitulé du poste : Postdoctoral researcher, AI for material discovery

Candidatures (CV et lettre de motivation) à adresser à drh-recrutement-contact@univ-lorraine.fr , à sylvie.hilbert@univ-lorraine.fr et à mathieu.d-aquin@univ-lorraine.fr avant le 26/06/2022

Date de la dernière mise à jour		Contexte de la dernière mise à jour
Date de création		
Numéro de version		

ETABLISSEMENT : Université de Lorraine
SERVICE ou U.F.R. : LORIA
VILLE : Nancy

AFFECTATION MULTI-SITES POUR L'AGENT : OUI / NON (l'agent exerce son activité *a minima* sur 2 sites distincts)
Si oui, les citer :

IDENTIFICATION DU POSTE

Branche d'Activité Professionnelle (BAP) :
Emploi-type de rattachement ([REFERENS](#) / [RIME](#) / [BIBLIOFIL](#)) :
Catégorie : A / B / C

Numéro de poste :
Poste occupé par :

Quotité de travail (exprimée en %) :

Encadrement : OUI / NON

Si oui, préciser le nombre d'agents encadrés et leur répartition par catégories :

- Encadrement direct : A / B / C
- Encadrement indirect : A / B / C

Fonction du responsable hiérarchique direct : Professeur / responsable de l'équipe K du loria
Identité du responsable hiérarchique direct : Mathieu d'Aquin

PRESENTATION GENERALE

Description de la structure d'affectation :

Ce post-doc d'1 an se déroulera au sein de l'équipe K du laboratoire LORIA (k.loria.fr) en forte interaction avec les membres et collaborateurs du laboratoire LEMTA (lemta.univ-lorraine.fr) impliqués dans le calcul ab-initio pour la découverte de matériaux (Laurent Chaput). L'équipe K possède un large éventail d'expertise dans les méthodes d'intelligence artificielle (IA), incluant les approches centrées sur les connaissances et le raisonnement automatisé ainsi que les méthodes centrées sur les données et les méthodologies de science des données. Notre objectif est de comprendre comment l'IA peut bénéficier de son intégration dans les connaissances existantes, et comment de nouvelles connaissances peuvent être découvertes et affinées grâce à l'application de l'IA. Le travail ici contribuera à une collaboration émergente entre les membres de l'équipe K et les membres du LEMTA pour explorer les réponses possibles à ces questions fondamentales qui peuvent émerger de l'application des techniques d'IA dans les activités scientifiques, y compris la découverte de matériaux.

Description du poste :

L'IA est d'ores et déjà un élément clé du processus scientifique, et l'objectif des travaux proposés ici est d'approfondir notre compréhension de ses apports potentiels et des méthodologies requises spécifiquement dans le domaine de la découverte de matériaux. La découverte de matériaux consiste à trouver des matériaux, parfois non encore synthétisés, qui présentent certaines caractéristiques. Comme dans de nombreux autres processus de découverte scientifique, le principal problème est que l'espace des matériaux possibles est très grand et qu'une approche par force brute est irréalisable : le calcul des caractéristiques les plus intéressantes des matériaux prend des millions d'heures CPU. Nous nous intéressons donc ici à l'utilisation de méthodes prédictives pour approximer les propriétés physiques recherchées, et donc générer un ensemble de matériaux candidats avec des valeurs prédites souhaitables pour ces propriétés physiques. Un petit sous-ensemble des candidats les plus prometteurs peut à ce stade être vérifié d'abord par calcul, puis par des expériences physiques après synthèse.

Un tel processus, s'il est effectif, pourrait avoir un impact très significatif sur la découverte de matériaux, en réduisant son coût et en augmentant son efficacité. Des expérimentations pour y parvenir ont déjà été menées à l'aide d'une petite base de données de matériaux de la même famille pour tenter d'identifier des matériaux à faible conductivité thermique. Cependant, cela reste limité à une approche spécifique de la prédiction, utilisant un petit ensemble des caractéristiques des matériaux.

Dans ce poste d'un an, l'objectif est donc de capitaliser sur ces premières expérimentations, de les prolonger et de les généraliser, non seulement pour montrer de manière plus systématique et plus large les résultats que l'on peut obtenir avec les méthodes d'IA dans de tels processus, mais aussi pour établir les bases d'une plate-forme d'IA, une boîte à outils, facilitant l'utilisation interactive de l'IA sur un large éventail de données et de caractéristiques des matériaux.

En d'autres termes, le candidat retenu travaillera vers les objectifs suivants :

- Comparer et contraster les méthodes d'IA pour la prédiction des matériaux, y compris les méthodes d'apprentissage automatique, l'apprentissage profond, l'apprentissage "few-shot", ainsi que les approches axées sur les connaissances.
- Mettre en place un processus d'ingénierie des caractéristiques, y compris l'analyse des caractéristiques existantes et possibles à inclure en tant que prédicteurs
- Établir les bases d'une plate-forme d'IA pour la découverte de matériaux, pour faciliter non seulement l'application des techniques d'IA et de science des données dans la découverte de matériaux, mais aussi le partage de données, y compris les résultats intermédiaires des calculs.

Ce travail sera co-encadré par Mathieu d'Aquin (LORIA) et Laurent Chaput (LEMTA).

Nous recherchons des candidats ayant soit une formation en informatique (en particulier l'IA) et un fort intérêt pour la physique/la science des matériaux, soit une formation en science des matériaux (en particulier les calculs ab-initio) et une expérience des techniques d'IA.

DETAIL DES MISSIONS ET ACTIVITES

Activités principales (déclinées par missions/ thèmes dans la limite de 5):

Mission 1 : / A ce titre l'agent doit (activités) : Comparer et contraster les méthodes d'IA pour la prédiction des matériaux, y compris les méthodes d'apprentissage automatique, l'apprentissage profond, l'apprentissage "few-shot", ainsi que les approches axées sur les connaissances.

Mission 2 : / A ce titre l'agent doit (activités) : Mettre en place un processus d'ingénierie des caractéristiques, y compris l'analyse des caractéristiques existantes et possibles à inclure en tant que prédicteurs

Mission 3 : / A ce titre l'agent doit (activités) : Établir les bases d'une plate-forme d'IA pour la découverte de matériaux, pour faciliter non seulement l'application des techniques d'IA et de science des données dans la découverte de matériaux, mais aussi le partage de données, y compris les résultats intermédiaires des calculs.

Activités associées :

- Exécuter des études factorielles sur des données existantes pour prédire la valeur des propriétés physiques spécifiques des matériaux en comparant différentes méthodes d'IA et différents paramètres.
- Identifier les forces et les faiblesses de méthodes spécifiques et proposer des moyens d'améliorer leurs résultats.
- Concevoir et mettre en œuvre un processus d'ingénierie des données pour la prédiction de matériaux
- Établir une base de code partageable pour l'application de l'IA en science des matériaux
- Contribuer à des publications en science des matériaux et/ou en informatique

COMPETENCES LIEES AU POSTE**Connaissances (limitées à 7)**

- Au moins quelques connaissances de base sur diverses méthodes d'IA en rapport avec la tâche
- Au moins quelques connaissances de base en chimie et en physique
- Connaissance des méthodes de traitement de données / d'ingénierie (soit qui s'appliquent spécifiquement à la science des matériaux, soit de manière générale)

Compétences opérationnelles (limitées à 7)

- Capacité à mettre en place un processus de traitement des données
- Une certaine capacité de programmation, idéalement en python
- Expérience dans l'application de l'IA

Compétences relationnelles (limitées à 7)

- Capacité démontrée à travailler dans un environnement fortement multidisciplinaire
- Bon communicant (en français ou en anglais)
- Bonnes capacités de présentation (en anglais)
- Bonnes compétences en rédaction académique (en anglais)

CONDITIONS ET CONTEXTE DE TRAVAIL**TEMPS DE TRAVAIL :**

Pics d'activités possibles : OUI / NON (si oui préciser les fréquences et périodes éventuelles)

Pics habituels pour écriture d'articles. Pas plus de 2 dans l'année, au moment des dates limites de soumission.

Modalités particulières de temps de travail (cf. règlement de gestion UL)

SANS OBJET Astreintes Permanences Horaires décalés Travail le weekend Travail de nuit
 Travail pendant les périodes de fermeture

Précisions complémentaires le cas échéant :

DEPLACEMENTS PROFESSIONNELS**Au sein de l'UL**

Occasionnels Intermittents Fréquents Permanents

En dehors de l'UL

Occasionnels Intermittents Fréquents Permanents

Précisions complémentaires le cas échéant : Déplacement entre le LORIA et le LEMTA (très proche).
Présentations des travaux possible en France ou à l'étranger.

PERIMETRE DU POSTE - RELATIONS FONCTIONNELLES

Travail réalisé plutôt seul Travail réalisé plutôt en équipe Travail réalisé régulièrement au contact du public / des usagers

Partenaires (internes/externes)

<i>Liens avec d'autres postes ou services</i>	<i>Nature du lien (travail collaboratif et journalier / échange hebdomadaire/ mensuel, collaboration ponctuelle)</i>

Partenaires externes :

<i>Liens avec d'autres partenaires externes de l'UL</i>	<i>Nature du lien (travail collaboratif et journalier / échange hebdomadaire/ mensuel, collaboration ponctuelle)</i>

AUTORISATIONS / HABILITATIONS SPECIFIQUES LIEES AU POSTE

FORMATIONS : Oui Non (si oui préciser les formations obligatoires liées au poste)

HABILITATIONS : Oui Non (si oui préciser les habilitations liées au poste)

AUTORISATIONS - ACCREDITATIONS : Oui Non

NIVEAU DE LANGUE(S) ETRANGERE(S) REQUIS SUR LE POSTE : Oui Non (si oui préciser ces données)
Bon niveau d'anglais (B1/C1) requis.

Autres :

EQUIPEMENTS SPECIFIQUES LIES AU POSTE

Oui Non (si oui préciser les équipements visés lunettes, casque, masque, vêtement, etc...)

INDEMNITES SPECIFIQUES LIEES A LA FONCTION :

Fonction reconnue par l'établissement comme ouvrant droit à la NBI : Oui Non

Si oui, précisez le nombre de points attribués à la fonction :

IPAGE : Oui Non

Si oui, à quel titre :

TENDANCE D'EVOLUTION DU POSTE

Facteurs d'évolution connus du poste par le responsable hiérarchique direct :

Impacts éventuels sur le poste, les missions et/ou compétences de l'agent connus par le responsable hiérarchique direct :