

## Offre de Stage pour l'Analyse Prédicative de Matériaux Thermoélectriques à l'aide de Réseaux de Neurones sur Graphes

### Contexte :

L'Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel (IMN) et le Laboratoire des Sciences du Numérique (LS2N) s'associent pour proposer un stage de six mois dans le domaine de la recherche de nouveaux matériaux pour l'énergie (Matériaux thermoélectrique). Ce projet vise à combiner l'expertise de l'IMN en matière de machine learning pour la découverte de nouveaux matériaux avec les compétences reconnues du LS2N dans le domaine des réseaux profonds, notamment les Graph Neural Networks (GNN).

**Durée :** 6 mois

**Période :** février/mars à Juillet/aout 2025

### Sujet :

Le projet s'appuie sur les avantages des Graph Neural Networks (GNN), des algorithmes d'apprentissage automatique capables d'analyser des structures de réseaux complexes, telles que les structures atomiques des matériaux. La collecte de données sur les propriétés de différents matériaux thermoélectrique a permis de former un premier modèle GNN pour prédire leurs propriétés en fonction de leur structure atomique. Plus précisément, chaque atome est représenté en tant que nœud du graphe, et les liaisons entre les atomes sont représentées par les arêtes. Cette représentation graphique des structures atomiques des matériaux est utilisée comme entrée pour le modèle GNN. La sortie du réseau est la prédiction des propriétés des matériaux associés à ces structures atomiques. Après optimisation de ce modèle, cette approche novatrice nous permettra d'identifier rapidement des candidats prometteurs comme matériaux thermoélectrique puis d'adapter ensuite ce modèle à d'autres applications (photovoltaïque, catalyse etc...).

### Profil Recherché :

Étudiant(e) en Master 2 ou en 5eme année de cursus ingénieur, avec une spécialisation en Data Science, Intelligence Artificielle, Machine Learning, ou domaine connexe. Une connaissance préalable en science des matériaux serait un atout. Compétences requises en programmation, notamment en Python, et une bonne compréhension des concepts liés aux réseaux profonds.

### Lieu du Stage :

Le stage se déroulera à Nantes entre l'IMN (Encadrants : David Berthebaud et Romain Gautier) et le LS2N (Encadrant : Harold Mouchère), offrant ainsi une opportunité unique de travailler au sein de deux institutions de recherche de premier plan.

### Candidature :

Envoyez votre CV, et lettre de motivation à [david.berthebaud@cnsr-imn.fr](mailto:david.berthebaud@cnsr-imn.fr), [romain.gautier@cnsr-imn.fr](mailto:romain.gautier@cnsr-imn.fr) et [harold.mouchere@univ-nantes.fr](mailto:harold.mouchere@univ-nantes.fr).

## Internship Offer for Predictive Analysis of Thermoelectric Materials with Graph Neural Network

### Context:

The Jean Rouxel Institute of Materials in Nantes (IMN) and the Laboratory of Digital Sciences (LS2N) are joining forces to propose a six-month internship in the field of researching new materials for energy (Thermoelectric materials). This project aims to combine the expertise of IMN in machine learning for the discovery of new materials with the recognized skills of LS2N in the field of deep networks, including Graph Neural Networks (GNN).

**Duration:** 6 months

**Period:** February/March to July/August 2025

### Subject:

The project will leverage the advantages of Graph Neural Networks (GNN), machine learning algorithms capable of analyzing complex network structures, such as the atomic structures of materials. Collecting data on the properties of different materials are used to train a GNN model to predict their properties based on their atomic structure. Specifically, each atom is represented as a node in the graph, and the connections between atoms are represented by edges. This graphical representation of atomic structures is used as input for the GNN model. The network's output will be the prediction of material properties associated with these atomic structures. After optimization, this innovative approach will enable the rapid identification of promising candidates thermoelectric then could be applied to other applications (photovoltaic, catalysis ...).

### Profile Sought:

Master's level student or 5th-year engineering student specializing in Data Science, Artificial Intelligence, Machine Learning, or a related field. Prior knowledge in materials science would be an asset. Required programming skills, especially in Python, and a good understanding of concepts related to deep networks.

### Internship Location:

The internship will take place in Nantes, bridging IMN (Supervisors: David Berthebaud and Romain Gautier) and LS2N (Supervisor: Harold Mouchère), providing a unique opportunity to work within two leading research institutions.

### Application:

Send your CV and motivation letter to [david.berthebaud@cnsr-imn.fr](mailto:david.berthebaud@cnsr-imn.fr), [romain.gautier@cnsr-imn.fr](mailto:romain.gautier@cnsr-imn.fr) and [harold.mouchere@univ-nantes.fr](mailto:harold.mouchere@univ-nantes.fr).