

Offre d'un stage de Master 2 recherche :

« Métaheuristique efficace pour la résolution structurale de nouvelles zéolithes »

- **Durée** : de 3 à 6 mois (en fonction de vos contraintes)
- **Employeur** : Université de Haute-Alsace
- **Location** : Institut IRIMAS, Mulhouse, France
- **Indemnités** : Taux légal en vigueur (environ 572 € par mois)
- **Encadrants** : Mathieu Brévilliers, Lhassane Idoumghar, Julien Lepagnot, Laurent Moalic, Taylan Ors & Jean-Louis Paillaud

1. Contexte

Une collaboration entre l'équipe [OMEGA de l'Institut IRIMAS](#) de l'UHA et l'axe [MPC de l'IS2M](#) avait permis d'avancer quant à la mise au point d'un nouvel algorithme traitant de la résolution structurale des zéolithes. Ainsi, à travers cette collaboration (1 M2 et 1 thèse), la génération de structures zéolithiques hypothétiques avait abouti à la génération de structures hypothétiques originales. Le nombre exponentiel de solutions potentielles et le coût en calcul de ce problème rendent l'utilisation des métaheuristiques significative pour cette thématique. Une nouvelle approche basée sur un algorithme génétique hybride parallèle pour les zéolithes en utilisant une modélisation modifiée de la fonction objectif pour trouver des structures zéolithiques hypothétiques, proches du critère de faisabilité thermodynamique, avait été établie. Une population constituée d'atomes aléatoires est initialisée et à chaque génération, un opérateur de croisement et une heuristique de mutation sont appliqués. Chaque individu de la population génère une structure zéolithique potentielle en appliquant les opérations de symétrie d'un groupe d'espace donné. Cette structure est évaluée avec une fonction objectif. Le système, pour fonctionner, a seulement besoin des paramètres de maille, du nombre d'atomes T par maille élémentaire et le groupe d'espace. Ces trois données sont généralement obtenues expérimentalement.

2. Mission

Votre travail de stage consistera à proposer et à développer un algorithme d'optimisation et une fonction objectif améliorés, sur la base des travaux réalisés précédemment. S'agissant d'un travail à l'interface entre les domaines de l'optimisation et de la chimie des matériaux, vous serez amené à discuter avec les membres de l'axe MPC de l'IS2M pour vous familiariser avec le domaine d'application, et pour bien comprendre tous les aspects du problème traité.

3. Compétences requises

- **BAC+4 ou BAC+5 (en cours) d'informatique ou de mathématiques appliquées.**
- **Très bonnes compétences en programmation.**
- Bonnes compétences en optimisation / recherche opérationnelle.
- Bonne maîtrise de l'anglais.

4. Candidature

Pour postuler, merci d'envoyer un courriel à julien.lepagnot@uha.fr avec les éléments suivants : **CV, lettre de motivation, relevés de notes des deux dernières années d'études.**

5. Bibliographie

- [1] Thèse de O. Abdelkafi, « Métaheuristiques hybrides distribuées et massivement parallèles », Mulhouse, 2016. Thèse soutenue sous la direction du Pr. L. Idoumghar.
- [2] O. Abdelkafi, L. Idoumghar, J. Lepagnot, J.-L. Paillaud, I. Deroche, L. Baumes & P. Collet, "Using a novel parallel genetic hybrid algorithm to generate and determine new zeolite frameworks", *Computers and Chemical Engineering*, 2017, Vol. 98, pp. 50-60.
- [3] O. Abdelkafi, L. Idoumghar, J. Lepagnot & J.-L. Paillaud, "Memory genetic algorithm hybridized for zeolites", *IEEE Congress on Evolutionary Computation*, San Sebastian, Spain, June 2017.
- [4] O. Abdelkafi, L. Idoumghar, J. Lepagnot & J.-L. Paillaud, "The determination of new stable zeolite frameworks using a parallel hybrid genetic algorithm", *International Workshop on Optimization and Learning: Challenges and Applications*, Alicante, Spain, February 2018.