

**Type d'offre :** Laboratory offer

**Post date :** 26.01.24

**IFPEN**

# **STAGE M2 - Exploration de l'utilisation de modèles de réseaux de neurones pour la dynamique moléculaire ab initio DFT**

## **Informations générales**

**Contract type :** Stage

**Contract length :** 5 mois

**Contact :**

[Morgane Menz](#)

[Thibault Faney](#)

**Starting date :** Fri 01/03/2024 - 12:00

**Trade :** Technicien

**Topic :** Représentation données et connaissances

**IFPEN :**

IFP Energies Nouvelles ([IFPEN](#)) est un acteur majeur de la recherche et de la formation dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. De la recherche à l'industrie, l'innovation technologique est au cœur de son action.

**Détail de l'offre (poste, mission, profil) :**

**Contexte de l'offre**

La dynamique moléculaire ab initio DFT (Density Functional Theory) est une méthode de simulation utilisée pour étudier les propriétés et les réactions moléculaires à l'échelle atomique. Cette méthode a l'avantage d'être précise mais nécessite des temps de calcul prohibitifs, ce qui la limite des systèmes et des échelles de temps de petites tailles. L'utilisation de modèles de réseaux de neurones (NN) offre une alternative prometteuse pour accélérer les calculs [1]. Cependant, des articles récents [2] montrent les limitations de l'utilisation des modèles de NN lorsqu'ils sont utilisés pour remplacer l'ensemble des calculs DFT d'une simulation de dynamique moléculaire.

Ce stage propose de tester les différentes librairies [3-5] de machine learning (ML) existantes pour les simulations de dynamique moléculaire menées à l'IFPEN et de reproduire le cadre (long temps de calculs) dans lequel les limitations de ces méthodologies ont été observées dans la littérature.

En fonction de l'avancement du stage, des stratégies alternatives prenant en compte la physique dans les modèles de ML pourront être explorées. On pourra par exemple tester des méthodes hybrides consistant à utiliser les prédictions par NN lorsqu'elles sont suffisantes et revenir aux résolutions DFT quand les prédictions ne sont pas suffisamment précises en se basant sur le résidu des équations de DFT.

Si vous êtes intéressé(e) par ce stage, envoyer votre CV à

[\*\*Morgane Menz\*\*](#)

[\*\*Thibault Faney\*\*](#)

**Lien vers l'offre sur le site dataia.eu :<https://da-cor-dev.peppercube.org/node/846>**