

DÉVELOPPEMENT D'UN POTENTIEL MACHINE LEARNING POUR DES SYSTÈMES ARGILEUX

LABORATORY : Institut Lumière Matière

LEVEL : M1
TEAM(S) : THEOCHEM

CONTACT(S) : ALLOUCHE Abdul rahman
MIGNON Pierre
SANZ Chloé

CONTACT(S) DETAILS: abdul-rahman.allouche[at]univ-lyon1.fr /
pierre.mignon[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472448314
chloe.sanz[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472431082

KEYWORD(S) :

SCIENTIFIC CONTEXT :

Le devenir des micropolluants organiques dans l'environnement est un problème majeur dans notre société actuelle. Les minéraux argileux naturellement abondants dans les sols jouent un rôle important dans la dégradation et la rétention de ces micropolluants. Le mécanisme d'absorption d'organiques sur les argiles fait l'objet de nombreuses études théoriques reposant soit sur des calculs de dynamique moléculaire (MD) en champ de force classique, ou en ab-initio (e.g. : Density functional theory DFT). Hors, ces méthodes se heurtent à des limitations entre précision et taille du model/temps de simulation.

Une approche alternative émergeant depuis plusieurs années est d'utiliser du machine learning entraîné sur des calculs DFT pour prédire la surface d'énergie potentiel de systèmes ciblés, ce qui permet d'allier la précision de calcul de la DFT avec la rapidité de calcul des champs de forces classiques [1].

De tels potentiels machine learning (MLP) sont en cours de développement pour différentes argiles : pyrophyllite, montmorillonite, saponite.

MISSIONS :

Le stage consistera à faciliter le développement de MLP pour des minéraux argileux. Cela consiste en la construction de bases de données amenant une réflexion sur la sélection des données, ou une réflexion sur le training particulièrement les descripteurs utilisés.

La-le stagiaire sera amené-e à utiliser plusieurs logiciels de calcul théorique ainsi que des logiciels de développement de réseau neuronal.

L'environnement de travail est sous station de travail Linux et la-le stagiaire sera amené-e à développer des outils bash ou python.

Encadrement et formation assurés au travail bibliographique, langages linux/bash/python, rédaction d'un rapport et présentation orale des travaux.

OUTLOOKS :

Profil du candidat : intéressé-e par les simulations numériques, le machine learning

BIBLIOGRAPHY :

[1] Jörg Behler and Michele Parrinello. "Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential Energy Surfaces". en. In: Physical Review Letters 98.14 (Apr. 2007), p. 146401. ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.146401.