



Développement d'un outil à l'interface entre la modélisation moléculaire et le machine learning: comment générer des configurations à l'équilibre thermodynamique de systèmes complexes ?

Contexte

Michelin est à la recherche constante de nouvelles solutions pour répondre aux exigences croissantes en termes de sécurité, de longévité et d'empreinte environnementale (économie d'énergie et pneumatiques plus verts). La conception de matériaux innovants de haute performance est par conséquent indispensable pour répondre à ces attentes sociétales et environnementales. La réalisation de telles avancées technologiques nécessite une compréhension fine des mécanismes physico-chimiques prenant place dans nos matériaux. La modélisation aux échelles moléculaires (à partir de calculs quantiques ou de dynamique moléculaire) permet d'apporter des éléments de compréhension et également de prédire des propriétés de nos futurs matériaux. Ces calculs moléculaires possèdent plusieurs limitations intrinsèques (notamment en termes d'échelle de temps simulables) que les méthodes de machine learning pourraient dépasser. Ce stage s'inscrit dans le développement et l'utilisation de méthodes de modélisation aux frontières entre la modélisation moléculaire et le machine learning. Ce stage présente l'avantage d'être à l'interface entre la recherche universitaire et industrielle, sa localisation étant partagée entre le centre de Recherche et Développement de Michelin, et le Laboratoire d'Informatique, de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes. Ce sujet de stage pourra déboucher sur une proposition de thèse au sein du laboratoire commun Simatlab, en fonction du niveau du candidat.

Mission et objectifs

Les simulations aux échelles moléculaires permettent d'étudier finement les phénomènes physiques très locaux prenant place dans nos matériaux. Elles présentent cependant l'inconvénient d'être limitées à des échelles de temps trop courtes devant les temps caractéristiques de relaxation des systèmes à base de polymère. Nous proposons donc d'employer durant ce stage des méthodes de machine learning récemment développées[1] afin de dépasser ces limitations. Nous nous baserons sur des techniques type réseaux de neurones génératifs afin de reconstituer à partir de trajectoires de dynamique moléculaire la distribution de micro-états à l'équilibre de systèmes polymère et de pouvoir générer des configurations équilibrées permettant de faire un lien avec la physique statistique. Des extensions de ces méthodes seront proposées durant le stage en fonction des résultats obtenus par le candidat, qui pourront faire l'objet d'une publication scientifique.

[1] F. Noé, S. Olsson, J. Köhler et H. Wu, « *Boltzmann generators: Sampling equilibrium states of many-body systems with deep learning* », Science, 365, 6457, 2019



Livrable

- Bibliographie sur les méthodes de machine learning dans le domaine de la modélisation moléculaire,
- Développement d'un outil basé sur les Boltzmann Generators permettant la génération de configurations moléculaires équilibrées,
- Adaptation des méthodes de réseaux de neurones génératifs afin d'étendre les applications de ces méthodes au sein du laboratoire commun Simatlab,
- Rapport sur le travail effectué durant ce stage.

Apport pour le candidat

- Approfondissement et application des connaissances acquises lors du cursus sur des cas concrets,
- Sujet multidisciplinaire entre les mathématiques, l'informatique et la physique,
- Découverte à la fois du milieu industriel et académique.

Interlocuteurs

- Experts en modélisation matériaux,
- Chercheurs en mathématiques appliquées et Machine Learning,
- Concepteurs outils et méthodes.

Profil recherché

- Expérience dans le domaine de la simulation numérique et du développement d'algorithmes,
- Intérêt pour la compréhension des phénomènes physiques,
- Le candidat doit être curieux, ouvert d'esprit, doit apprécier le travail en équipe et savoir s'adapter à différents environnements de travail.

Formation souhaitée

Bac +5 avec une formation en mathématiques appliquées et/ou en physique théorique. Dans l'idéal, le candidat doit avoir eu une première expérience ou de solides connaissances dans le domaine du Machine Learning.

Mois de début

Entre Janvier et Avril 2021

Mois de fin

Entre Juillet et Octobre 2021

Durée

6 mois



Localisation du stage

Laboratoire d'Informatique, de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes
Campus Universitaire des Cézeaux
1 rue de la Chebarde

63178 Aubière

Centre Technologique de Michelin
6 Rue bleue
63118 Cébazat

Personne à contacter

benoit.latour@michelin.com