

Contrats doctoraux 2026

Titre du projet de thèse : Développement de champs de force par approche Machine Learning : le cas des actinides

Directeur(s) de thèses : Florent Réal (PhLAM) / Alejandro Rivero Santamaría (PhLAM)

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

Les champs de force classiques (MM, champs de force traditionnels) permettent généralement de décrire de façon satisfaisante les interactions interatomiques. Toutefois, leur capacité à représenter des systèmes complexes, soit fortement polarisables soit avec des charges sur les ions élevés demeure limitée, comme par exemple les actinides en solution, mais également de plusieurs processus d'intérêt atmosphérique où la description fine des interactions électrostatiques et de la réponse électronique locale est essentielle. Dans nos travaux antérieurs, nous avons développé un champ de force classique avancé intégrant un grand nombre de termes physiques, y compris des contributions à n-corps, et reposant sur des calculs ab initio. Malgré sa précision, la paramétrisation d'un tel modèle devient rapidement irréalisable dès que l'on souhaite inclure des environnements plus diversifiés, combinant différents ligands ou contre-ions par exemple.

L'objectif de cette thèse est de concevoir et tester une méthodologie de construction de champ de force de nouvelle génération fondé sur des approches de Machine Learning (ML). Ce modèle sera entraîné à reproduire fidèlement les surfaces d'énergie issues de calculs ab initio et devra permettre la modélisation précise de la dynamique moléculaire des systèmes sélectionnés dans leurs environnements. Un tel champ de force ML offrira une flexibilité accrue par rapport aux approches paramétrées classiques, permettant d'intégrer naturellement des interactions complexes et non linéaires, tout en conservant une précision proche des méthodes ab initio et en réduisant considérablement les coûts de calcul.

L'ensemble de ces développements permettra au doctorant d'acquérir non seulement des compétences scientifiques solides, mais également une expertise en programmation, en intelligence artificielle et en traitement de données.

Date de recrutement envisagée : 01/09/2026

Contact (adresse e-mail) : florent.real@univ-lille.fr

Remarques/commentaires supplémentaires :
