



Offre n°2025-08880

Post-Doctoral position at CERMICS: "Computing transition rates: models and algorithms"

Niveau de diplôme exigé : PhD or equivalent

Fonction : Tempary Research Position

Principales activités

Post-doctoral position: "Computing transition rates: models and algorithms"

Keywords: molecular dynamics, machine learning, rare event sampling

Net salary: Approximately 2400 Euros per month, subject to discussion based on the candidate's experience.

Duration: 12 months, renewable up to 18 months.

Position to be fulfilled as soon as possible. Application from 30th April to 30th June 2025.

Contacts: Tony Lelièvre (tony.lelievre@enpc.fr) and Isabelle Simunic (isabelle.simunic@enpc.fr)

The aim of this project is to efficiently and accurately compute reaction rates of chemical transformations, typically in the field of catalytic chemistry (for instance alcohol isomerization). A first task will be to quantitatively study the limitations of approximate formulas obtained from harmonic transition state theory (Eyring-Kramers or Eyring-Polanyi formulas), by comparing the predictions of these approximate theories to reference results obtained either by direct numerical simulations or using dedicated numerical methods such as the adaptive multilevel splitting (AMS) algorithm [1]. A second task will be to improve the performance of AMS by combining it with importance sampling techniques and building good reaction coordinates, relying on neural networks such as bottleneck autoencoders,

which have proved successful for free energy computations [2,3]. Improved reaction coordinate can be obtained by minimizing the total reaction rate of the associated effective dynamics [4].

This postdoctoral fellowship is funded by the PEPR B-best, through the project MAMABIO, whose overall goal is to develop new numerical methods to study reactions of transformation of biosourced molecules, in collaboration with Hadrien Vroylandt from University of Caen Normandy, IFP Energies nouvelles (Pascal Raybaud, Thomas Pigeon, Manuel Corral-Valero), and the group of Christoph Chipot (CNRS, University of Lorraine).

[1] T. Pigeon, G. Stoltz, M. Corral-Valero, A. Anciaux-Sedrakian, M. Moreaud, T. Lelièvre, P. Raybaud, Computing surface reaction rates by Adaptive Multilevel Splitting combined with machine learning and ab initio molecular dynamics, J. Chem. Theory Comput. 19(12), 3538–3550 (2023)
<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00280>

[2] Z. Belkacemi, M. Bianciotto, H. Minoux, T. Lelièvre, G. Stoltz and P. Gkeka, Autoencoders for dimensionality reduction in molecular dynamics: collective variable dimension, biasing and transition states, J. Chem. Phys 159, 024122 (2023)
<https://doi.org/10.1063/5.0151053>

[3] Z. Belkacemi, P. Gkeka, T. Lelièvre, G. Stoltz, Chasing collective variables using autoencoders and biased trajectories, J. Chem. Theory Comput. 18(1), 59-78 (2022) <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00415>

[4] W. Zhang, C. Hartmann and C. Schutte, Effective dynamics along given reaction coordinates, and reaction rate theory, Faraday Discussions, 195, 365-394 (2016)
<https://doi.org/10.1039/C6FD00147E>

Avantages

- Subsidized meals
- Partial reimbursement of public transport costs
- Leave: 7 weeks of annual leave + 10 extra days off due to RTT (statutory reduction in working hours) + possibility of exceptional leave (sick children, moving home, etc.)
- Possibility of teleworking and flexible organization of working hours
- Professional equipment available (videoconferencing, loan of computer equipment, etc.)
- Social, cultural and sports events and activities

Informations générales

- **Thème/Domaine** : Numerical schemes and simulations
Scientific computing (BAP E)
- **Ville** : Paris
- **Centre Inria** : [Centre Inria de Paris](#)
- **Date de prise de fonction souhaitée** : 2025-04-30
- **Durée de contrat** : 1 year, 8 months
- **Date limite pour postuler** : 2025-06-02

Contacts

- **Équipe Inria** : [MATERIALS](#)
- **Recruteur** :
Lelièvre Tony / Tony.Lelievre@inria.fr

A propos d'Inria

Inria est l'institut national de recherche dédié aux sciences et technologies du numérique. Il emploie 2600 personnes. Ses 215 équipes-projets agiles, en général communes avec des partenaires académiques, impliquent plus de 3900 scientifiques pour relever les défis du numérique, souvent à l'interface d'autres disciplines. L'institut fait appel à de nombreux talents dans plus d'une quarantaine de métiers différents. 900 personnels d'appui à la recherche et à l'innovation contribuent à faire émerger et grandir des projets scientifiques ou entrepreneuriaux qui impactent le monde. Inria travaille avec de nombreuses entreprises et a accompagné la création de plus de 200 start-up. L'institut s'efforce ainsi de répondre aux enjeux de la transformation numérique de la science, de la société et de l'économie.

Attention: Les candidatures doivent être déposées en ligne sur le site Inria. Le traitement des candidatures adressées par d'autres canaux n'est pas garanti.

Consignes pour postuler

Sécurité défense :

Ce poste est susceptible d'être affecté dans une zone à régime restrictif (ZRR), telle que définie dans le décret n°2011-1425 relatif à la protection du potentiel scientifique et technique de la nation (PPST). L'autorisation d'accès à une zone est délivrée par le chef d'établissement, après avis ministériel favorable, tel que défini dans l'arrêté du 03 juillet 2012, relatif à la PPST. Un avis ministériel défavorable pour un poste affecté dans une ZRR aurait pour conséquence l'annulation du recrutement.

Politique de recrutement :

Dans le cadre de sa politique diversité, tous les postes Inria sont accessibles aux personnes en situation de handicap.