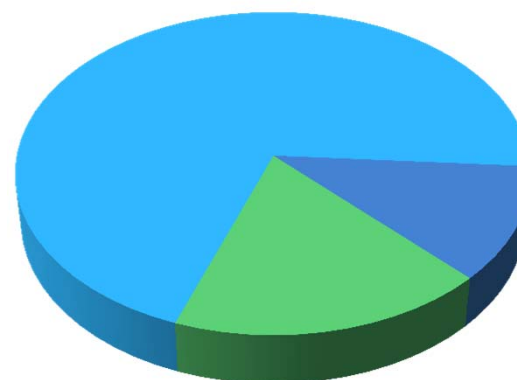
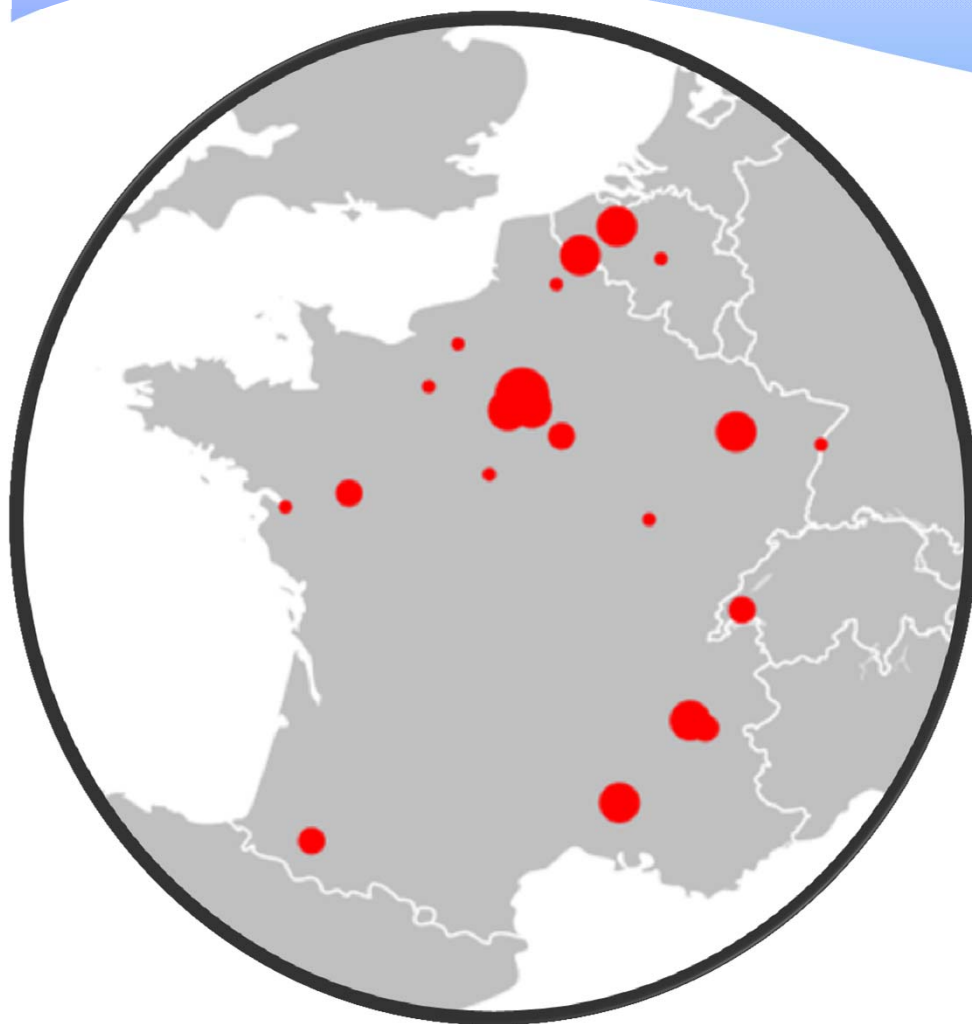


# Workshop « L'intelligence artificielle pour la chimie des matériaux »

25 septembre 2018, ICMPE, Thiais

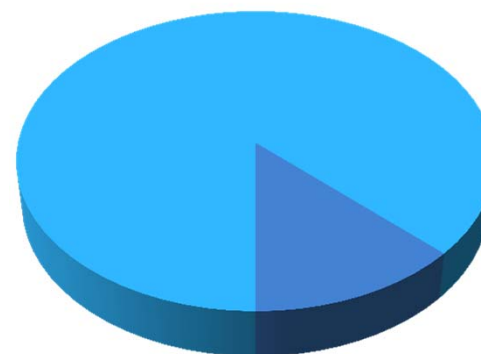


# 67 inscrits



## secteur

- académique
- industriel
- CEA

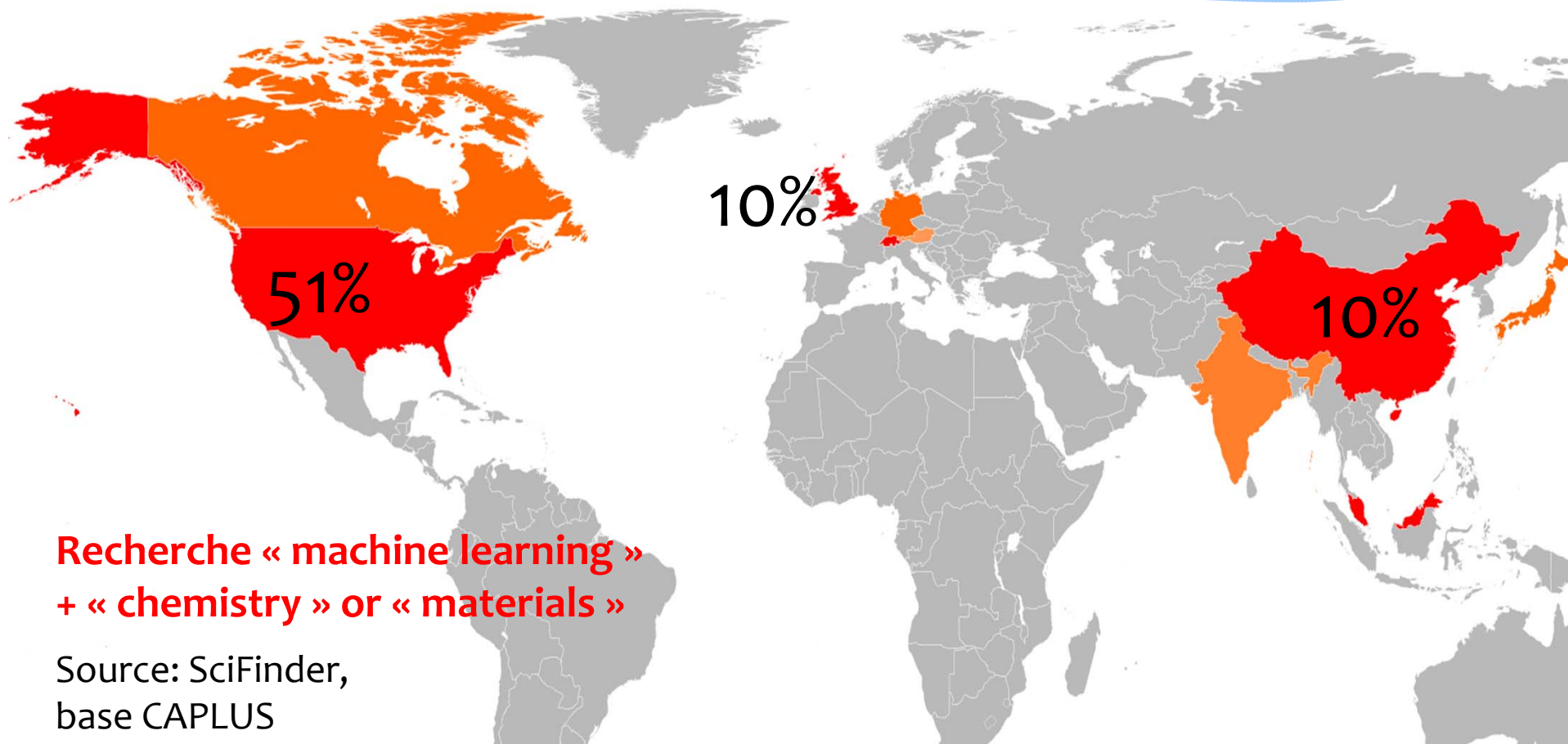


## discipline

- chimie / matériaux
- mathématique / informatique

# top10 du Nb. de publications

France ~ 1%



Recherche « machine learning »  
+ « chemistry » or « materials »

Source: SciFinder,  
base CAPLUS

# Une très brève histoire de l'IA

1950



Test de Turing

1990



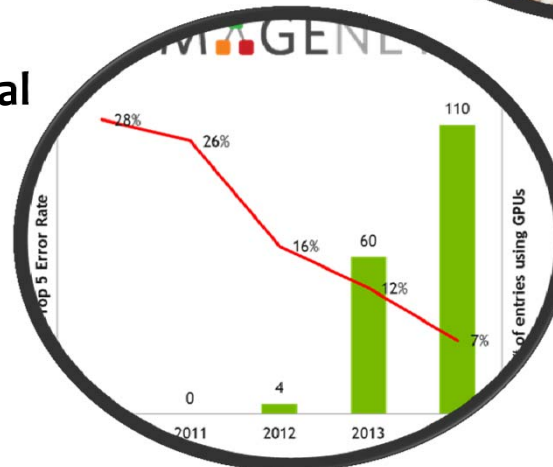
réseau neuronal convolutif

1956



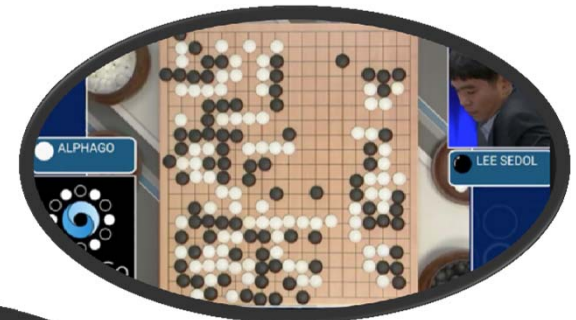
« artificial intelligence »

2012



Imagenet Challenge

2016

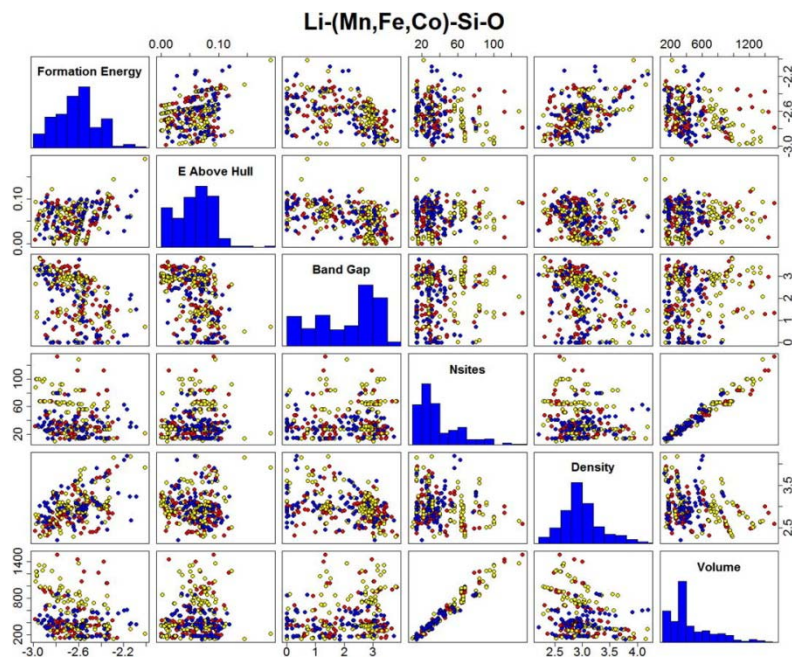


AlphaGo

# L'IA pour la chimie et la science des matériaux ?

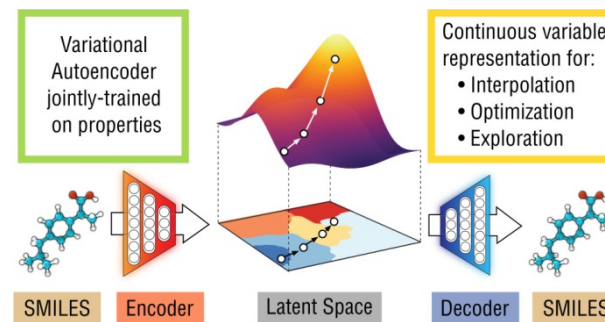
## Apprentissage supervisé

+ (Data mining; High-throughput; ...)  
 → détection, prédiction, material design

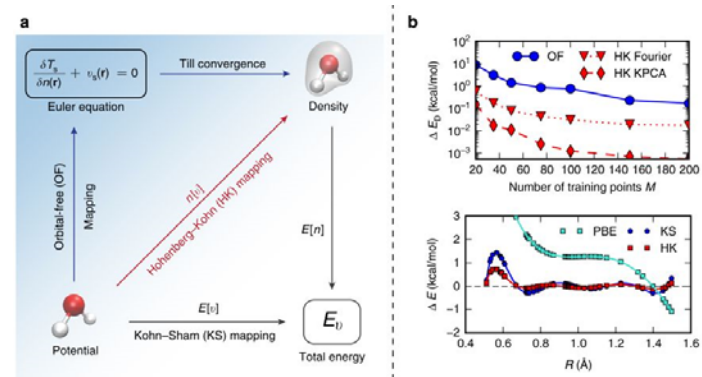


Shandiz et al, 2016

+ (evolutionary approach; GAN; ...)  
 → Génération de données



Gómez-Bombarelli,  
 ACS Cent. Sci 2018



Brockherde et al,  
 nature 2017

# Programme

Langues : français, anglais

## Abstracts online:

are addressing deficiencies of the "classical" interatomic potentials while staying computationally efficient. We present an interatomic machine-learning potential trained on DFT calculations using artificial neural networks (ANN). Our algorithm simultaneously trains on the DFT data for energies and atomic forces. This leads to the more efficient utilization of the DFT data as well as an increased accuracy of the potential. Our machine-learning potential is also universal in terms of the size of the system and its chemical composition. We demonstrate its versatility and accuracy via computing various properties of solids and compare the results with direct DFT calculations.

### Modélisation prédictive des relations propriétés-composition dans les verres d'oxydes

16:15-16:35

Damien Perret<sup>1</sup>, Alexandra Garcin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives – DE2D/SEVT/LDMC – CEA Marcoule 30207 Bagnols-sur-Cèze – France

Depuis une cinquantaine d'années, le verre est utilisé comme matériau de confinement des déchets nucléaires de haute et moyenne activité. Le besoin de modéliser et de prédire via une approche statistique et empirique les propriétés des verres nucléaires en fonction de leur composition a débuté dans les années 90. Les études antérieures consistaient en une évaluation paramétrique des propriétés des verres en fonction de la composition, en faisant varier un ou deux composants autour d'une composition de référence. Cette méthode nécessite d'effectuer un grand nombre de formulations et ne permet d'expliquer la variation de propriété qu'autour d'une composition de référence. Le besoin de connaître la variation des propriétés d'intérêt en tout point du domaine de composition s'est avéré rapidement nécessaire et cependant incompatible avec une approche paramétrique simple d'une part, et avec un grand nombre d'éléments chimiques à faire varier en même temps, d'autre part. La complexité de la composition du verre nucléaire rend impossible l'utilisation d'outils théoriques (DFT, dynamique moléculaire, contraintes topologiques) et nécessite le développement de modèles statistiques empiriques. Parmi les propriétés d'intérêt à modéliser, on peut citer la durabilité chimique du verre, la température de transition vitreuse, ou encore la viscosité de la fonte verrière.

09:00 - 09:30		<i>Accueil des participants</i>
09:30 - 09:40	Michel Latroche & Jean-Claude Crivello	<i>Message de bienvenue</i>
09:40 - 10:10	Nataliya Sokolovska	<i>Application of Machine Learning for Materials Science</i>
10:10 - 10:30	Ambroise van Rookeghem	<i>Machine learning and high-throughput computational screening</i>
10:30 - 10:50	Edern Menou	<i>Computer-assisted design of complex metallic alloys</i>
10:50 - 11:05		<i>pause café</i>
11:05 - 11:35	Hédi Soula	<i>Generalized Stochastic simulation algorithm for Artificial Chemistry</i>
11:35 - 11:55	Thomas Cauchy et Benoit Da Mota	<i>Prédire une géométrie moléculaire convergée par des modèles d'apprentissage automatique</i>
11:55 - 12:15	Asma Atamna	<i>Generative Adversarial Networks for Finding New Crystal Structures</i>
12:15 - 13:35		<i>déjeuner + POSTER</i>
13:35 - 14:35	Michele Ceriotti	<i>Machine Learning Like a Physicist</i>
14:35 - 14:55	Michael Sluydts	<i>How many materials are left to discover? An exploration of quaternary space</i>
14:55 - 15:15	Maarten Cools-Ceuppens	<i>Evaluating a linear machine learning force field for aluminium</i>
15:15 - 15:35		<i>pause café</i>
15:35 - 15:55	Gilles Marcou	<i>Chemical space modeling and visualization with generative topographic maps</i>
15:55 - 16:15	Anton Bochkarev	<i>Accurate deep neural network potential for predicting properties of solids</i>
16:15 - 16:35	Damien Perret	<i>Modélisation prédictive des relations propriétés-composition dans les verres d'oxydes</i>
16:35 - 17:00		<i>Table ronde, discussion, conclusions</i>

# Infos pratiques

## Accès Wifi



1) Nom du réseau :  
**eduroam**

2) Nom du réseau :  
**Campus-Thiais**

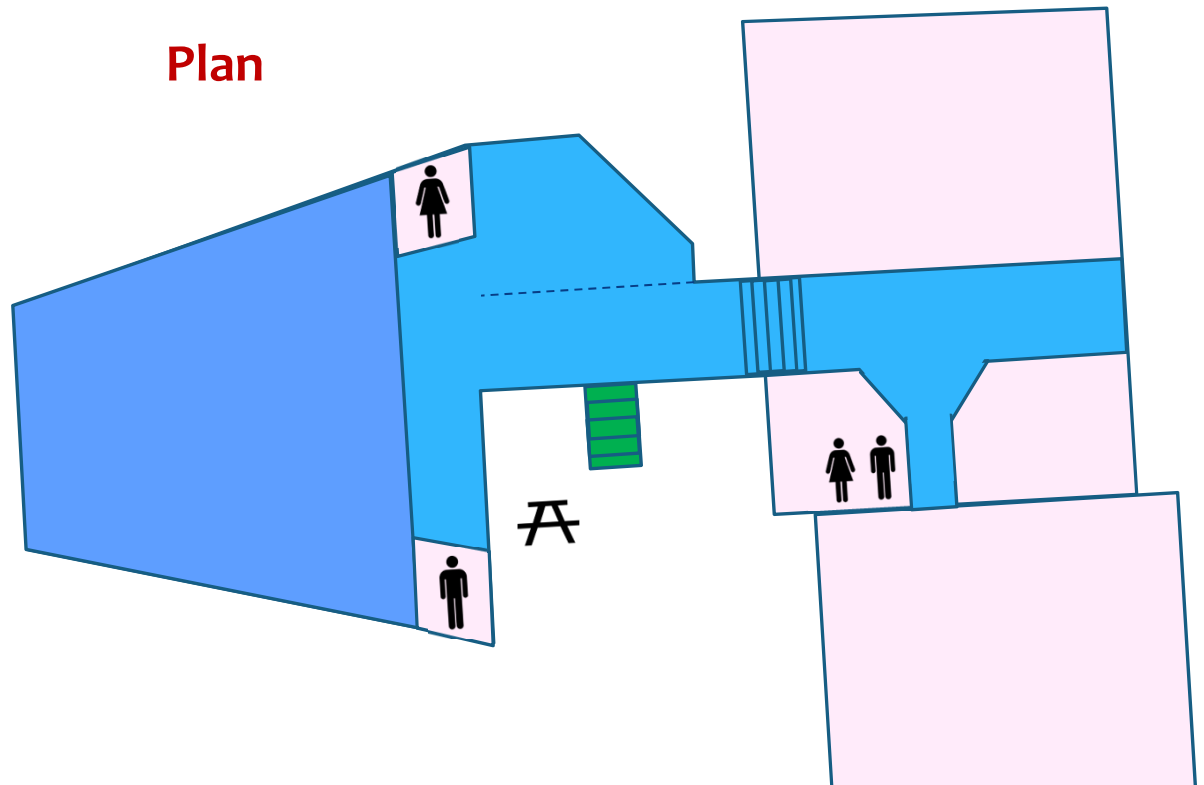
Mot de passe :  
**CampusCNRSdeThiais**

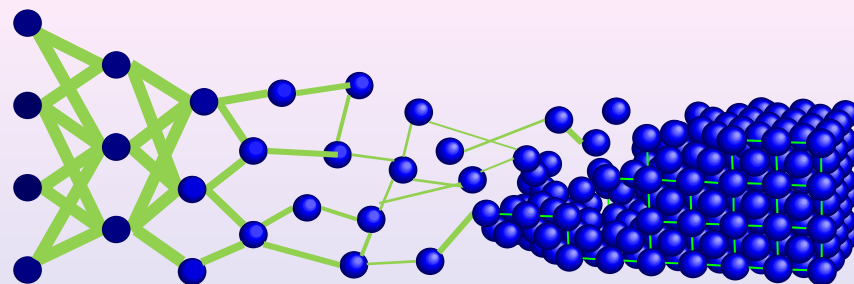
## Twitter

**@ai4mater**



## Plan





# Workshop « L'intelligence artificielle pour la chimie des matériaux »

25 septembre 2018, ICMPE, Thiais





# Table ronde

- 1) **Quelle attente de la communauté des chimistes ?**
- 2) **Quelle méthode pour un problème donné ?**
- 3) **Comment trouver du *manpower* ?**
- 4) **Comment contribuer à construire une BD cohérente ?**
- 5) **...?**
- 6) **Et après ce workshop ?**