



Atelier du GDR IAMAT

A l'ONERA Châtillon - salle Contensou - du 19 au 21 janvier 2026

Lundi 19 janvier 2026

13:00 - 13:25 : *Accueil des participants*

13:25 - 13:30 : **Emmanuel Farhi (SOLEIL)** - Ouverture de l'atelier du GDR IAMAT

Chairman : Emmanuel Farhi

◦ **13:30 - 14:30** : **Konrad Hinsen (CNRS)**

Des données aux modèles et vice versa : l'évolution de la science à l'ère numérique

◦ **14:30 - 15:00** : **Cynthia Herrera Contreras (CEA)**

Standardisation ontologique des workflows pour l'interopérabilité en sciences des matériaux

◦ **15:00 - 15:30** : **Session Flash Posters**

15:30 - 16:00 : *Pause café*

Chairman : Edern Menou

◦ **16:00 - 17:00** : **Jean-Luc Parouty (SIMaP)**

Des données et des neurones pour représenter le monde et l'interpréter

◦ **17:00 - 17:30** : **Sami Ben Elhaj Salah (Safran Tech)**

Étude du potentiel des LLM pour la prédiction de propriétés thermomécaniques de nouveaux alliages

Mardi 20 janvier 2026

09:00 - 09:30 : *Accueil des participants*

Chairman : Armand Barbot

◦ **09:30 - 10:30** : **Jean-Philippe Poli (CEA)**

IA symbolique pour le traitement des données expérimentales

◦ **10:30 - 11:00** : **Sabrina Ghanes (ONERA)**

Development of a high-throughput approach to assess oxidation resistance using chemically graded Ni-based superalloys

11 : 00 - 11 : 30 : Pause café

Chairman : Sami Ben Elhaj Salah

- **11 : 30 - 12 : 00 : François Bottin (CEA)**
Simulations ab initio accélérées par Machine Learning
- **12 : 00 - 12 : 30 : Santiago Alonso Gil (ILL)**
Apo-Holo : a neural network to predict residue-level backbone and side-chain displacements during the formation of CAZyme sugar complexes

12 : 30 - 14 : 00 : Déjeuner buffet et Session Posters

Chairman : Riccardo Gatti

- **14 : 00 - 15 : 00 : Franck Tancret (Université de Nantes)**
Conception de matériaux par exploitation de données rares, bruitées ou incomparables
- **15 : 00 - 15 : 30 : Lucas Fine (Université Claude Bernard Lyon 1)**
Configuration and dynamics of hydride ions in the nitride-hydride catalyst Ca₃CrN₃H : Insights from inelastic neutron scattering and molecular dynamics simulations

15 : 30 - 16 : 00 : Pause café

Chairwoman : Sabrina Ghanes

- **16 : 00 - 16 : 30 : Luis Alonso Gonzalez Garcia (GPM - Université de Rouen Normandie)**
On the clustering of evaporation phenomena in Atom Probe Tomography
- **16 : 30 - 17 : 00 : Nguyen-Thi Van-Oanh (Laboratoire de Chimie Physique)**
Optimizing Training Datasets for Machine Learning Interatomic Potentials in Bimetallic Nanoparticles Using Dimensionality Reduction and Clustering

Mercredi 21 janvier 2026

09 : 00 - 09 : 30 : Accueil des participants

Chairman : Mikael Perrut

- **09 : 30 - 10 : 30 : Pierre Kerfriden (Centre des Matériaux, Mines Paris - PSL)**
L'IA et la science des données pour la modélisation des matériaux : progrès, succès et perspectives
- **10 : 30 - 11 : 00 : Emilie Gaudry (IJL)**
Applications des bases de données DFT pour la caractérisation des surfaces des matériaux

11 : 00 - 11 : 30 : Pause café

Chairman : Matthieu Degeiter

- **11 : 30 - 12 : 00 : Nohayla Reragui (LaMcSci - Université Mohamed V)**
Matériaux bidimensionnels à base de phosphore pour les batteries métal-ion : approches théoriques et perspectives
- **12 : 00 - 12 : 15 : Emmanuel Farhi (SOLEIL)** - Clôture de l'atelier du GDR IAMAT