



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 Hinsén (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** : **Fariba Ebrahimian (PIMM)** - TBC

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 Tancrét (Université de Nantes)**
Conception de matériaux par exploitation de données rares, bruitées ou incomparables
- **15:00 - 15:30** : **Anruo Zhong (CEA)**
Building machine learning force fields : problem-specific databases still matter in the era of big models

15:30 - 16:00 : *Pause café*

Chairman : Matthieu Degeiter

- **16:00 - 16:30** : **Lucas Fine (Université Claude Bernard Lyon 1)**
Configuration and dynamics of hydride ions in the nitride-hydride catalyst $\text{Ca}_3\text{CrN}_3\text{H}$: Insights from inelastic neutron scattering and molecular dynamics simulations
- **16:30 - 17:00** : **Viacheslav Shkirskiy (ITODYS)**
Dynamic optical image analysis combined with unsupervised clustering enhances detection capabilities
- **17:00 - 17:30** : **Luis Alonso Gonzalez Garcia (GPM - Université de Rouen Normandie)**
On the clustering of evaporation phenomena in Atom Probe Tomography

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*

Chairwoman : Sabrina Ghanes

- **11:30 - 12:00** : **Nohayla Regragui (LaMcSci - Université Mohamed V)**
Matériaux bidimensionnels à base de phosphore pour les batteries métal-ion : approches théoriques et perspectives
- **12:00 - 12:30** : **Nguyen-Thi Van-Oanh (Laboratoire de Chimie Physique)**
Optimizing Training Datasets for Machine Learning Interatomic Potentials in Bimetallic Nanoparticles Using Dimensionality Reduction and Clustering
- **12:30 - 12:45** : **Emmanuel Farhi (SOLEIL)** - Clôture de l'atelier du GDR IAMAT