

AMETHYST – JEAN FRANÇOIS GÉRARD

CONCEPTION DE MATÉRIAUX POLYMÈRES ACCÉLÉRÉE PAR L'IA ET LE HAUT DÉBIT

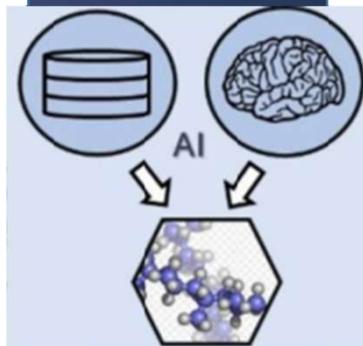
ENJEUX

- **Enjeux structurants**

Expérimenter sur des cas d'école représentatifs de matériaux polymères, le potentiel du couplage IA-haut débit

- **Enjeux sociétaux**

Explorer les infinies combinaisons possibles des briques de construction des matériaux polymères Matériaux durables et circulaires (recyclables, réutilisables, réparables) et à faible impact Matériaux multifonctionnels



OBJECTIFS

- **Plateformes**

- Synthèses et formulations de matériaux polymères haut débit (liquide-fondu / non réactif-réactif)
- Séquençage haut-débit + librairie pour composés cellulosiques
- Logiciels spécifiques sur infrastructure souveraine et sécurisée

- **Cas d'école**

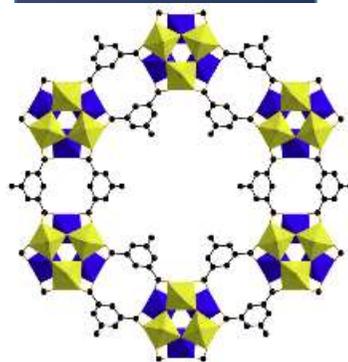
- Polymères à dégradation programmée
- Polymères (nano-) composites
- Hybrides polymères/charge inorganique
- Polymères bio-sourcés

MOF-LEARNING – CHRISTIAN SERRE

ACCELERATING THE DESIGN OF MOFS THROUGH A MACHINE LEARNING ASSISTED HIGH-THROUGHPUT METHODOLOGY

ENJEUX

- Accélérer la découverte des matériaux poreux MOF
- Couplage matériaux poreux-interactions spécifiques
- Séparation, purification des gaz stratégiques...
- Matériaux pour l'énergie (production de H₂, conversion CO₂...)



OBJECTIFS

- Méthodes d'apprentissage automatique (descripteurs, taille pores, sites acides/basiques...)
- Analyse bases de données
- Synthèse et caractérisation haut-débits (hydro/solvothermal...)
- Corrélations structures (synthèse) – propriétés, guidées par l'IA

ADAM – LAURENT ORGEAS

ACCELERATED DESIGN OF ARCHITECTURED MATERIALS

ENJEUX

- Design de nouveaux matériaux architecturés aux mésostructures et propriétés physiques et mécaniques optimisées pour l'énergie, le transport et la santé
- Focus sur les matériaux architecturés métalliques et bio-sourcés élaborés par impression 3D et 4D



OBJECTIFS

- Caractérisation accélérée et massive : essais thermo-mécaniques automatisés avec observations 3D operando/ in situ par μ tomographie RX synchrotron
- IA pour l'analyse d'images
- IA hybride pour la simulation numérique et l'optimisation des procédés et architectures

METSA – PASCALE BAYLE-GUILLEMAUD

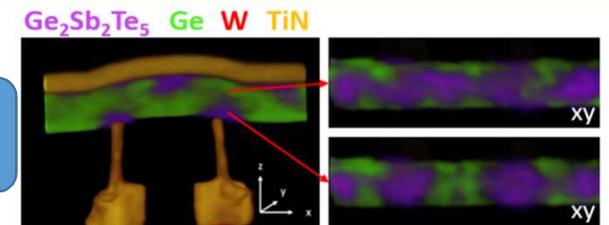
SCANNING ELECTRON TOMOGRAPHIES USING DIRECT ELECTRON DETECTORS AND INNOVATIVE ALGORITHMS

ENJEUX

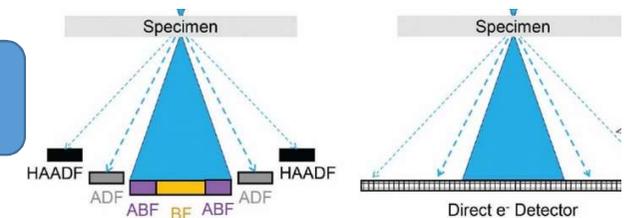
- Imagerie 3D accélérée dans un Microscope Electronique à Transmission – résolution nanométrique (vers la résolution atomique)
- Large gamme de matériaux accessible → applications Energies, Numérique , autres ...

OBJECTIFS

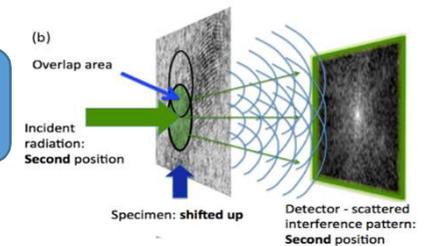
IMAGERIE
CHIMIQUE



DÉTECTION
DIRECTE



RECONSTRUCTION
IMAGE 3D



SYNCHROTRON SOLEIL - JEAN-PASCAL RUEFF

ENJEUX

- Améliorer la compréhension des matériaux (structure, couplage)
- Caractérisation avancée (lien structure - fonctionnalité)
- Guider la conception de nouveaux matériaux
- Matériaux quantiques
- Matériaux pour la production / stockage de l'énergie (batterie, cellule solaire, catalyse...)
- Matériaux pour le stockage / transfert des données
- Matériaux intelligents



OBJECTIFS

- Vision multi-techniques, multi-échelles grâce aux différentes lignes de lumière
- Automatisation / robotisation des expériences
- Workflow de données amélioré
- Accélération de l'acquisition de données (hardware / software)
- Réduction / traitement de données assisté par l'IA
- Accès simplifié au synchrotron via BAG ou hub dédié

SYNCHROTRON ESRF - ETIENNE BUSTARRET

ENJEUX

- Accès élargi et plus efficace de la communauté Matériaux au faisceau de 4^{ème} génération de l'ESRF (résolution ++ espace, temps, énergie ; cohérence ++).
- Matériaux de structure : analyse en ligne de la synthèse et mise en forme de métaux et alliages métalliques (DIAMS).
- Matériaux fonctionnels (énergie, IT, etc) : caractérisation multi-échelle des structure et composition : surfaces, poudres, volume.
- Procédés *operando* : microréacteurs, batteries en fonctionnement, catalyse, synthèse HPHT, etc.



OBJECTIFS

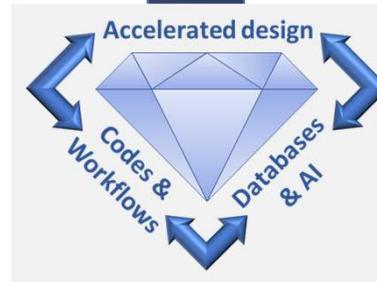
- Accélérer la caractérisation par diffraction, diffusion et absorption des rayons X sur 4 lignes CRG françaises (synergie avec Equipex+ en cours).
- Automatisation/robotisation des expériences, porte-échantillons standard
- Assistance par IA de la conduite d'exp. (du criblage à l'*operando* sous conditions contrôlées).
- Détection rapide, réduction en tps réel (IA).
- Alimentation de bases de données.
- Accès simplifié aux expériences et aux interprétations (traitement assisté IA).

DIAMOND – FRANÇOIS WILLAIME

DATA MANAGEMENT AND INFRASTRUCTURES FOR ARTIFICIAL INTELLIGENCE, MODELLING, OPTIMIZATION AND NUMERICAL DESIGN

ENJEUX

- Démocratisation des codes Matériaux et des solutions numériques basées sur l'IA
- Automatisation des simulations et de l'analyse des données expérimentales pour permettre le haut-débit
- Collecte, stockage, interrogation et extraction de données sur les Matériaux
- Prédiction par le calcul de nouveaux Matériaux à propriétés sur-mesure



OBJECTIFS

- Développer une infrastructure numérique d'entreposage et distribution de conteneurs de codes et workflows
Déployer des bases de données Matériaux et les outils nécessaires à leur exploitation en particulier par l'IA
- En lien avec les projets ciblés, développer des démonstrateurs utilisant ces infrastructures numériques