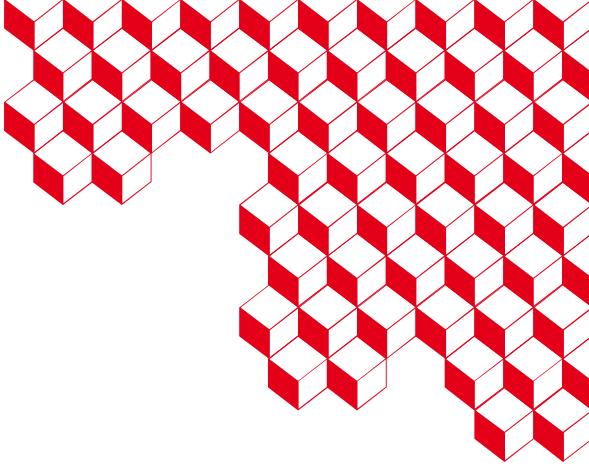
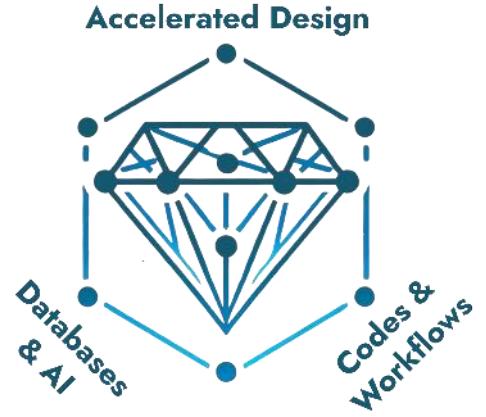




DIAMOND
ANR-22-PEXD-0015



Rôle de l'IA dans le développement accéléré des matériaux

François WILLAIME

CEA, Centre d'Etudes de Saclay, Direction Scientifique des Energies



Plan

- Le PEPR DIADEM
- La plateforme numérique DIAMOND
- Rôle de l'IA dans le développement accéléré des matériaux

Dispositifs Intégrés pour l'Accélération du DEploiement de Matériaux Emergents
Discovery Acceleration for the Deployment of Emerging Materials

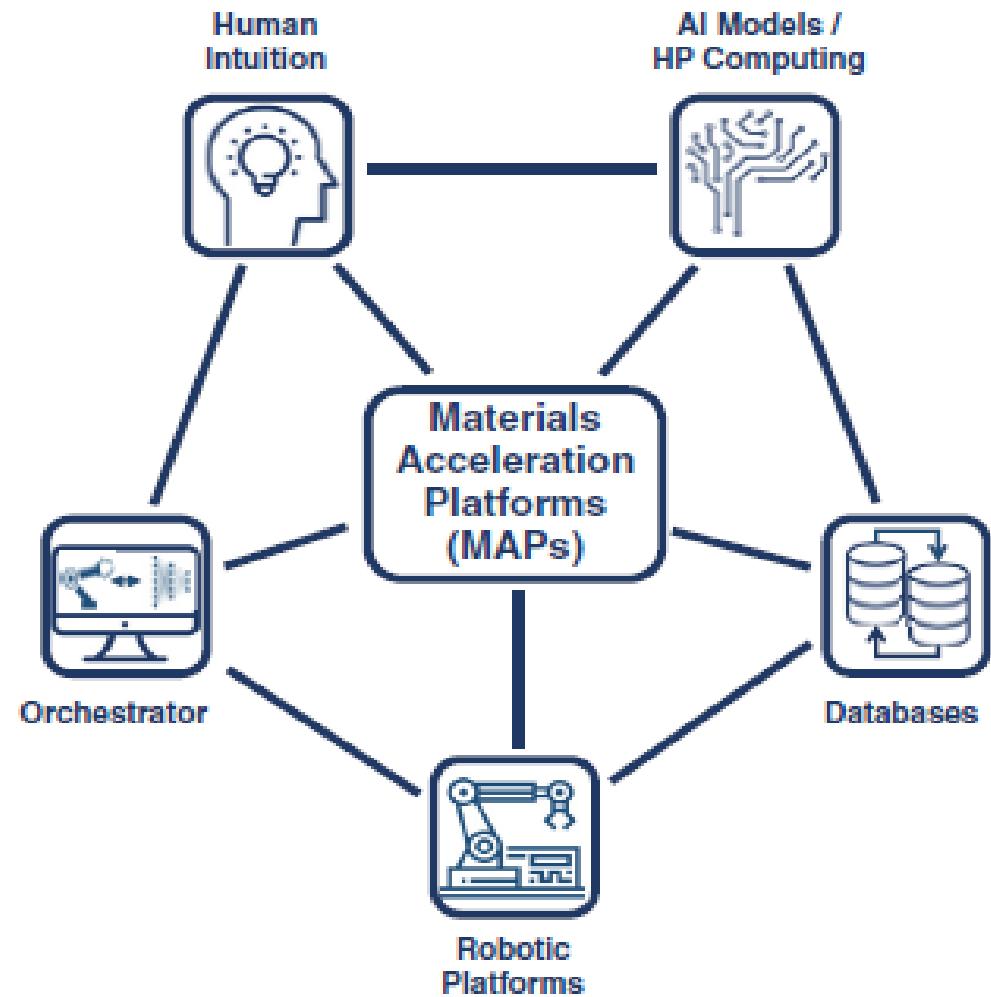
Bases de Données, outils d'Intelligence Artificielle, de Modélisation et d'OptimisatioN pour le Design numérique de matériaux
Data management and Infrastructures for Artificial intelligence, Modelling, Optimization and Numerical Design



La découverte accélérée des matériaux

DEFIS

- De nombreux domaines technologiques reposent sur la découverte des matériaux : énergie, transport, santé, transition numérique...
- La mise en œuvre effective des nouveaux matériaux est d'autant plus retardée (plus d'une décennie d'essais et d'erreurs) que leur complexité augmente
- Contexte du **Green Deal** et exigences en matière de croissance durable : maîtrise du cycle de vie, sobriété énergétique, minimisation de l'utilisation des ressources critiques



e.g. Materials Genome Initiative aux USA (2011)



PEPR exploratoire DIADEM



Programme et équipements prioritaires de recherche sur **le développement de matériaux innovants par l'intelligence artificielle**

© Didier CATT/CNRS Photobanque / Frandix

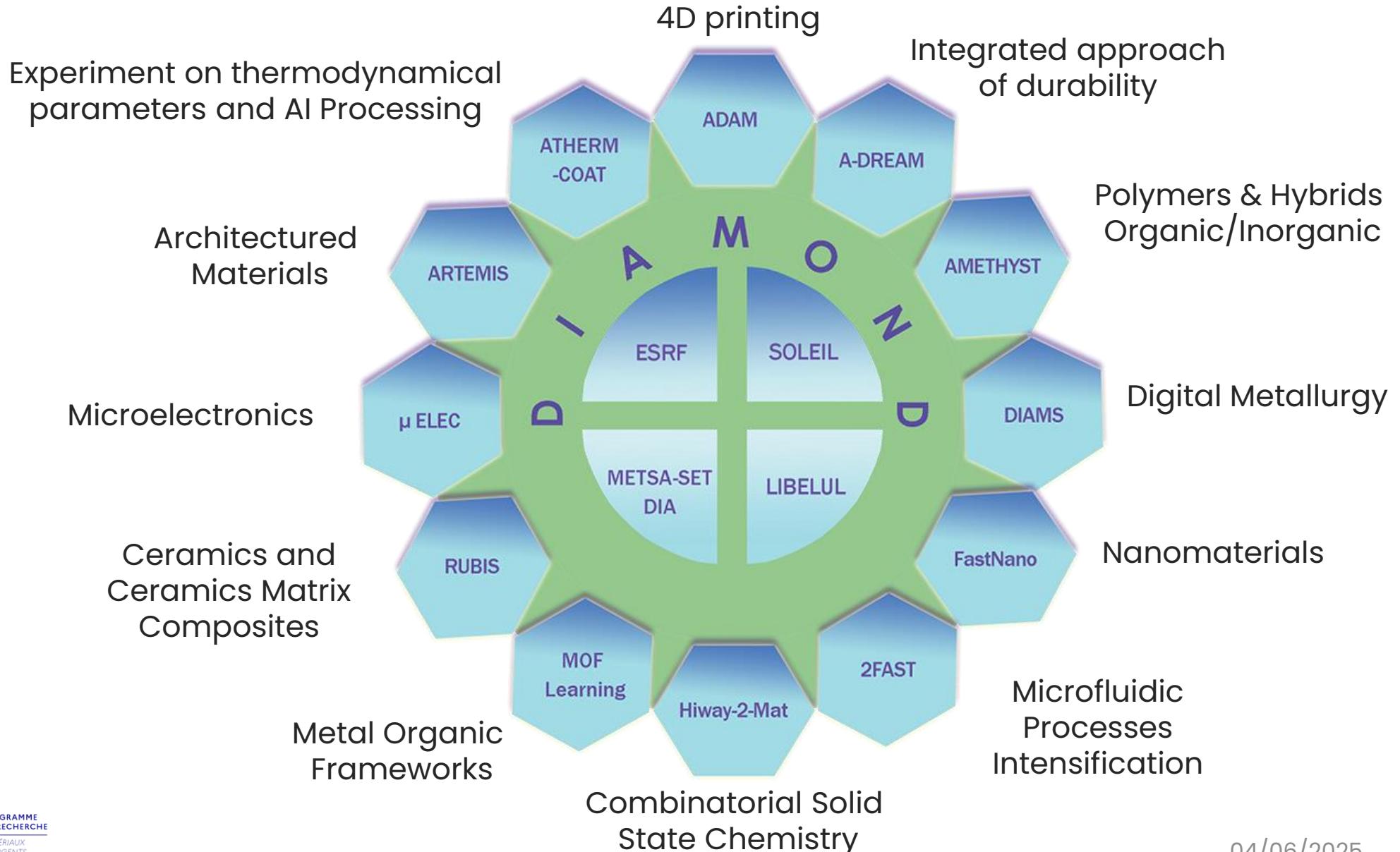
Piloté par



Budget : 84 M€ sur 8 ans (2022 – 2029)

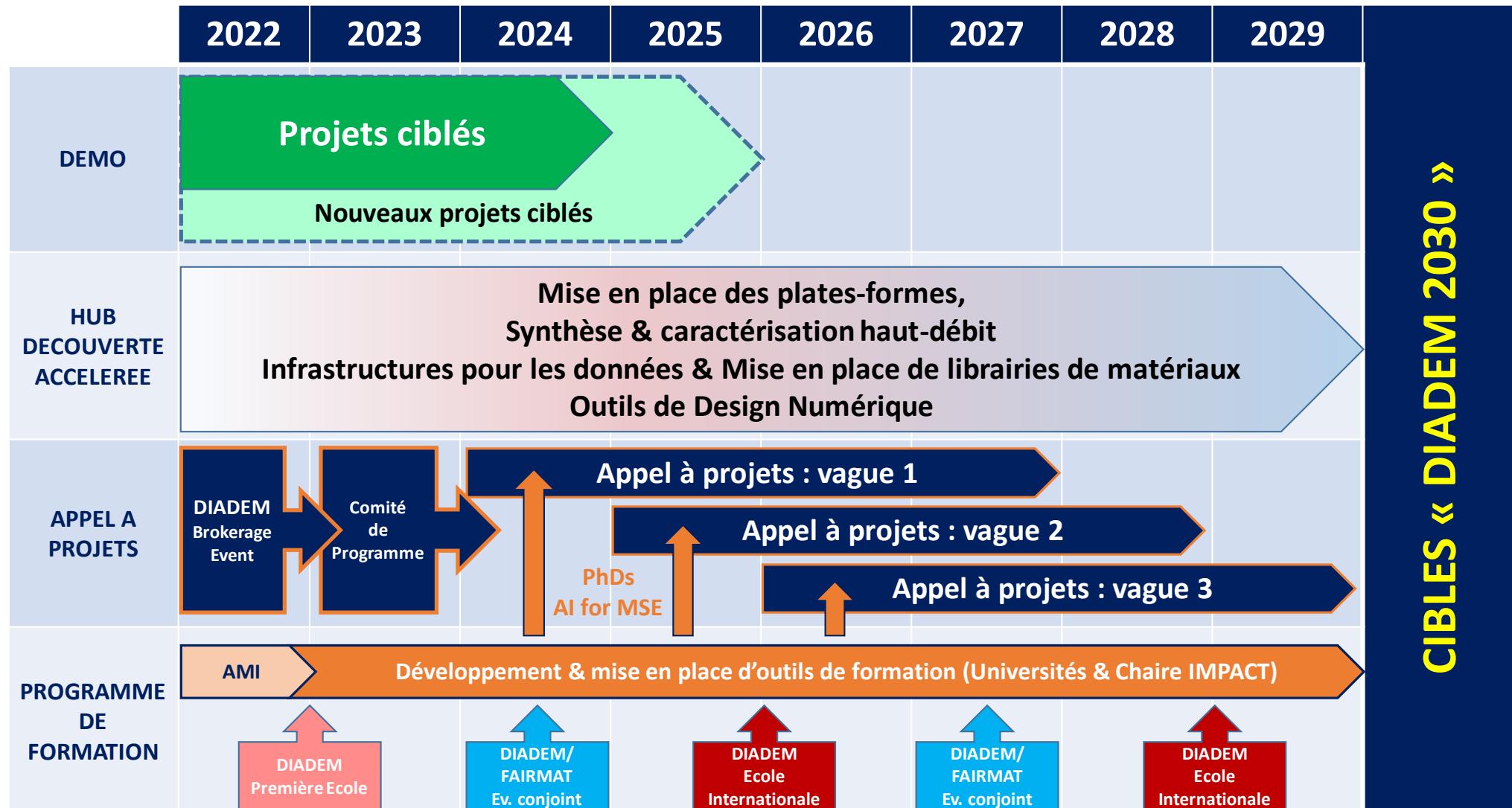


17 projets ciblés de démonstration : Plateformes ouvertes assistées par l'IA au cœur du dispositif





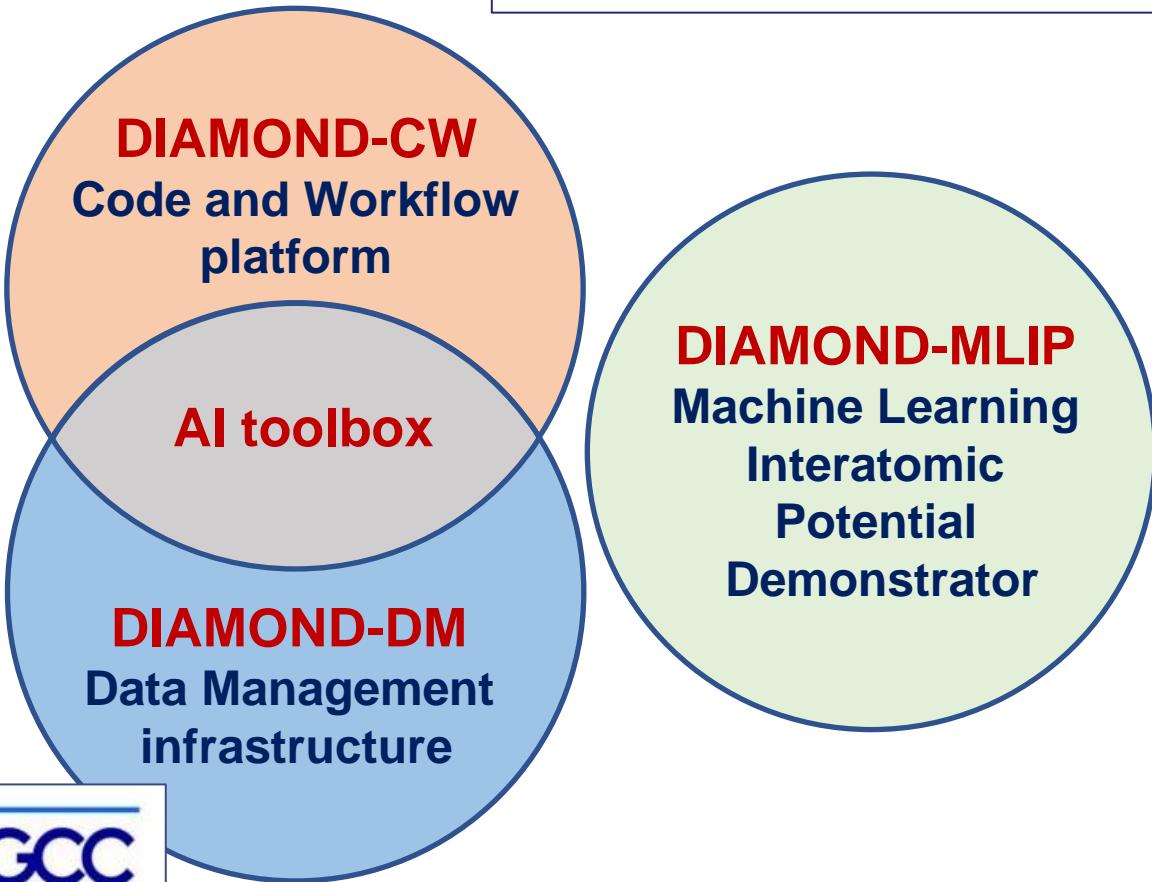
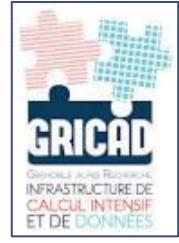
Planning global du PEPR DIADEM





DIAMOND digital platform

Coordinator: François Willaime (CEA/DES)
Vice-coordinator: Noël Jakse (SIMaP, Grenoble)
Duration: 2023-2026



PROGRAMME
DE RECHERCHE
MÉTALLURGIE
ÉMERGENTE

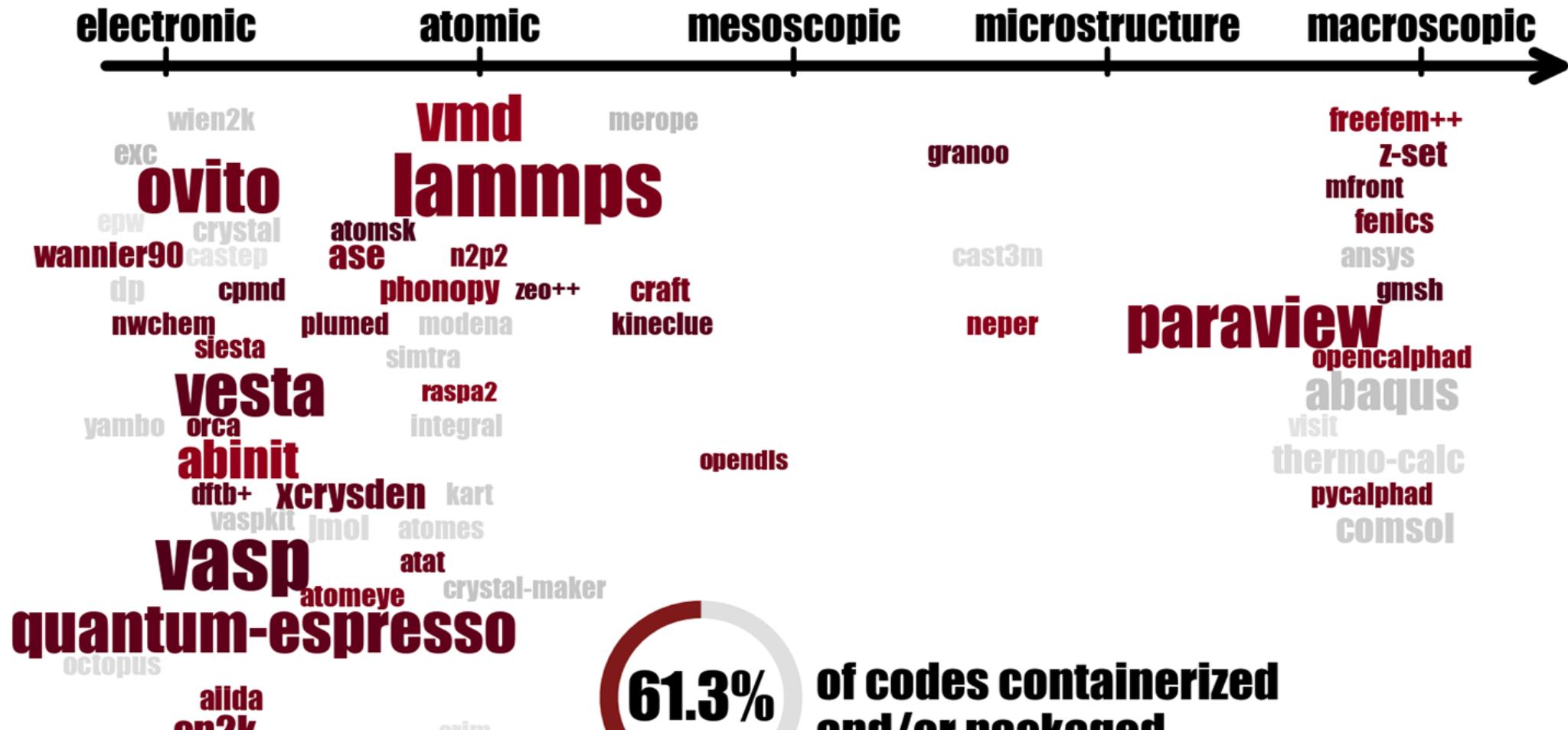
<https://diamond-diadem.github.io/>

Role of Artificial Intelligence (AI):

- Simulations augmented and accelerated by AI (CW)
- Integrated in workflows (CW)
- AI toolbox for data analysis (DM)
- At the heart of DIAMOND-MLIP



DIAMOND-CW: containerized codes



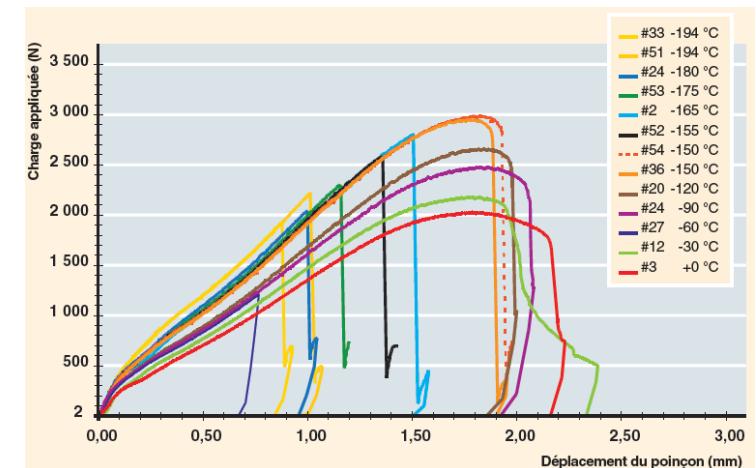
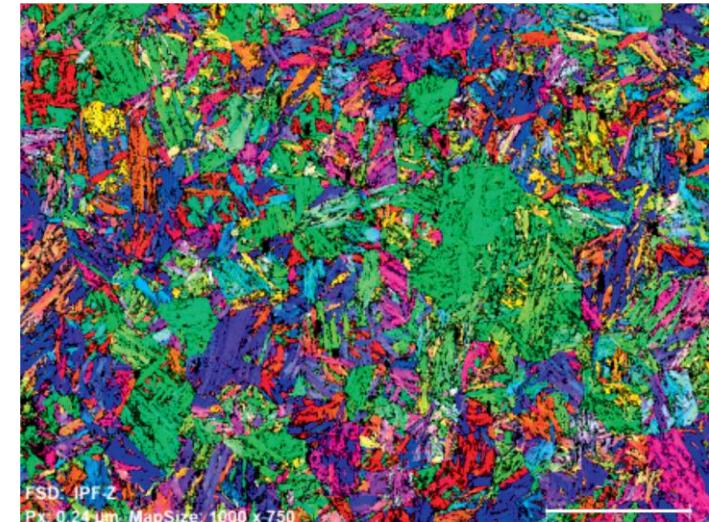
61.3%
of codes containerized
and/or packaged



DIAMOND-DM : Data management infrastructure

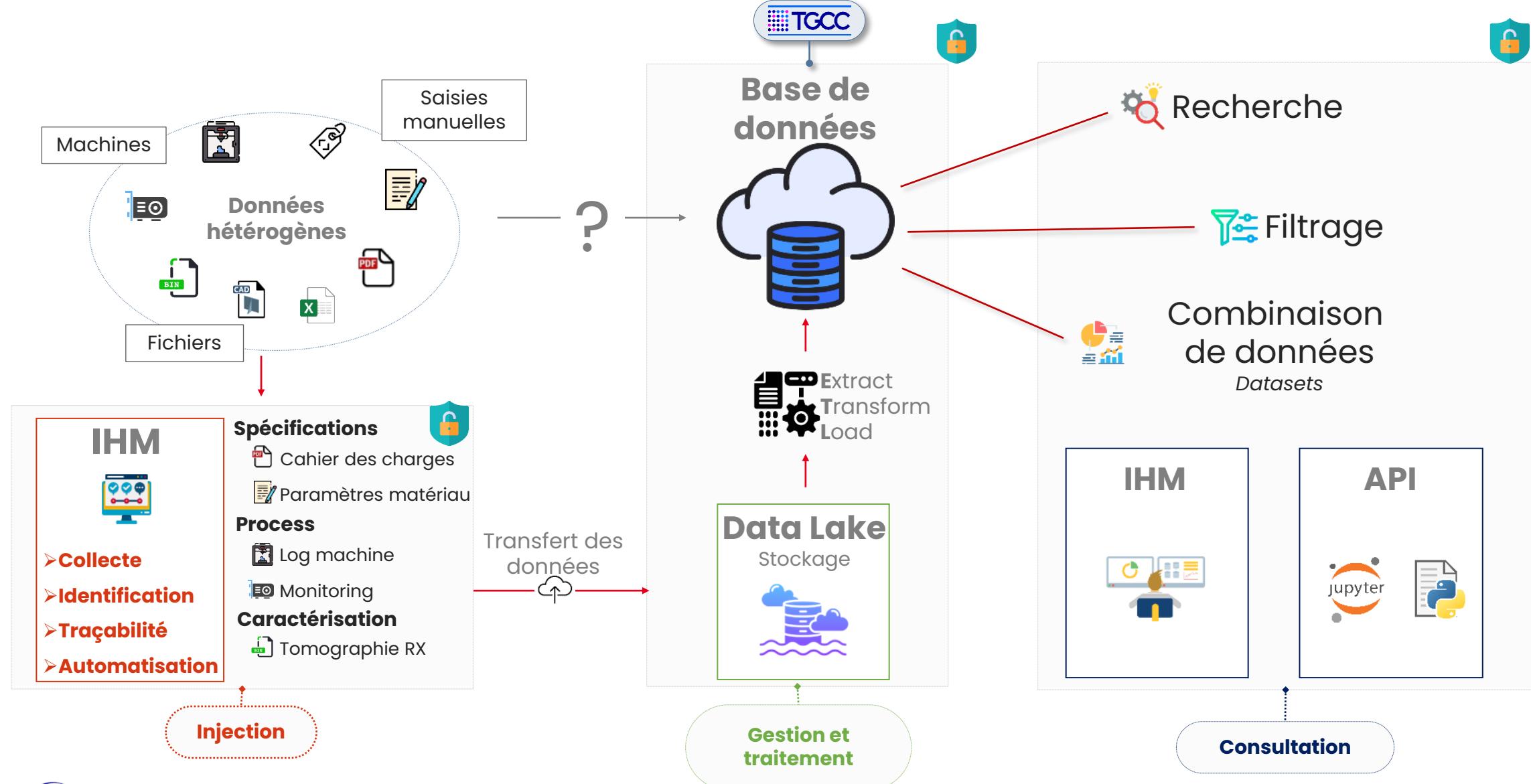


- **Nombreux « producteurs » de données expérimentales :** caractérisation chimique et structurale (MET, SAT, DRX, SAXS, Raman, LIBS, IBA, ...), mécanique, optique, ...
- Certaines communautés sont très avancées pour la gestion de leurs données (synchrotrons)
- L'objectif est de développer des outils pour aider les communautés les moins avancées à construire leurs bases de données pour **rendre ces données « AI ready »**
- Accompagnement pour définir un schéma de base de données





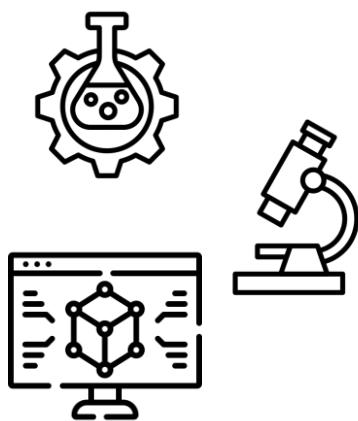
Architecture (développement en cours)





■ Quelques exemples d'utilisation de l'IA

- Synthèse
- Caractérisation
- Simulation



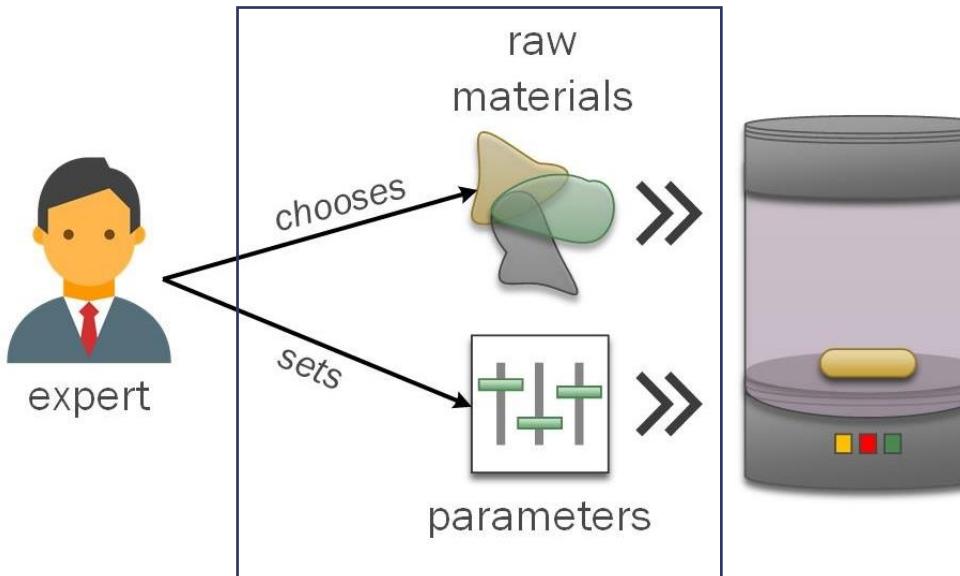


Optimizing Experimental Design with AI

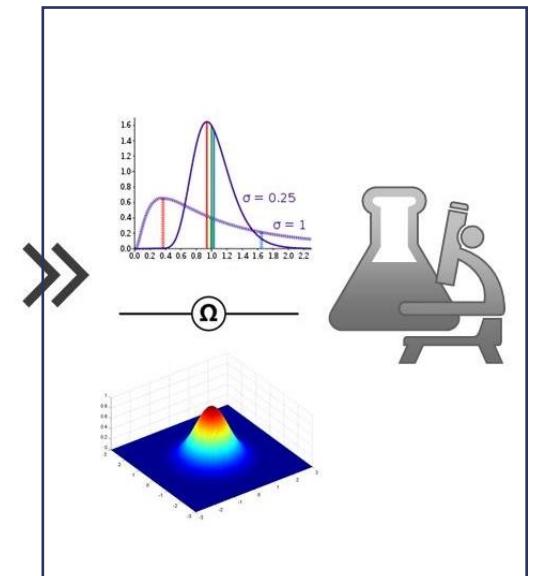


ExpressIF Materials® : explainable artificial intelligence as a virtual companion

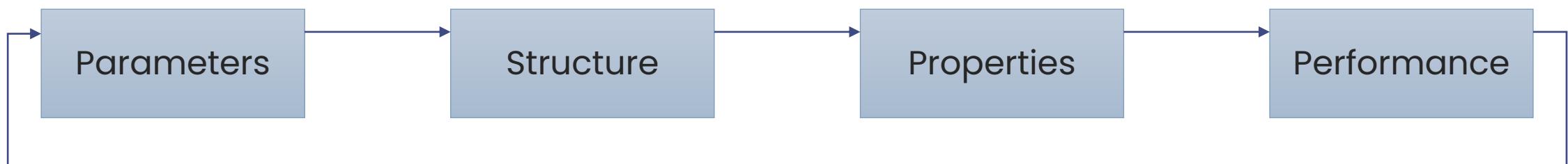
Predicts the next experiment



Predicts the properties



examines



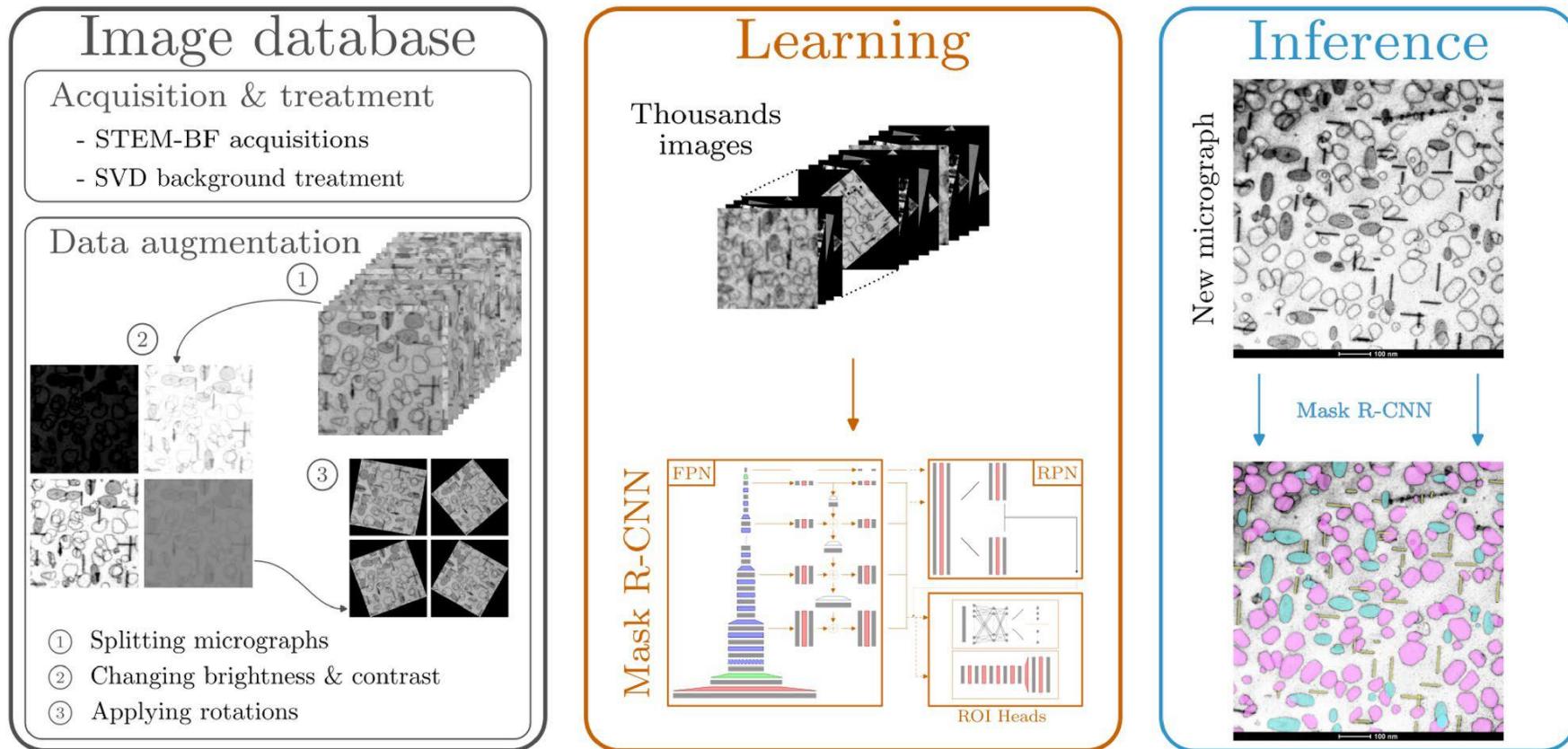
Recommends the next experiment to perform

Jean-Philippe POLI, CEA/DRT/LIST, Saclay



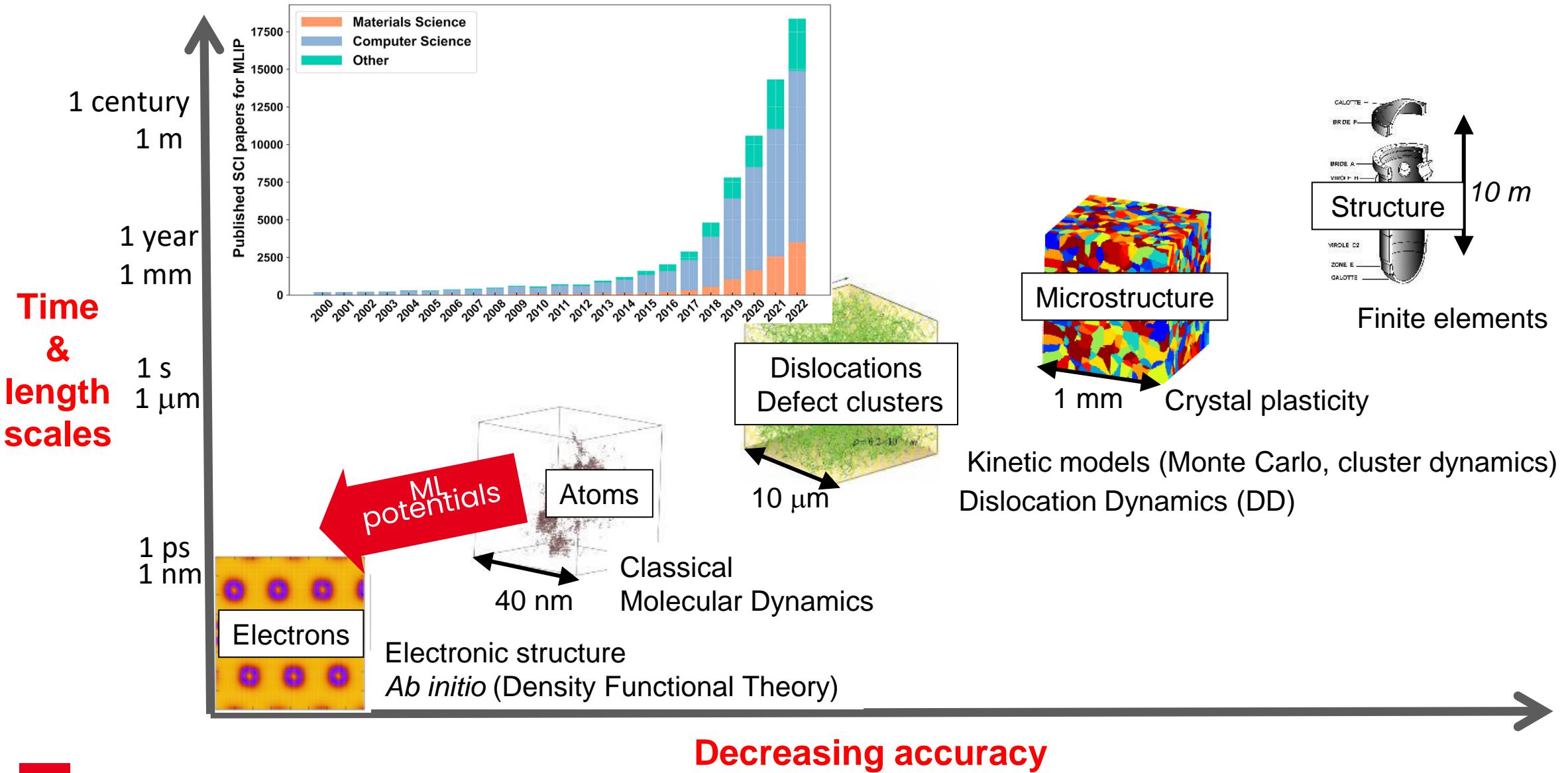
Improving efficiency and accuracy of materials characterisation through AI-driven data analysis and interpretation

Example: characterization of dislocation loops in ion-irradiated CrFeMnNi alloys observed by Scanning transmission electron microscopy (STEM)



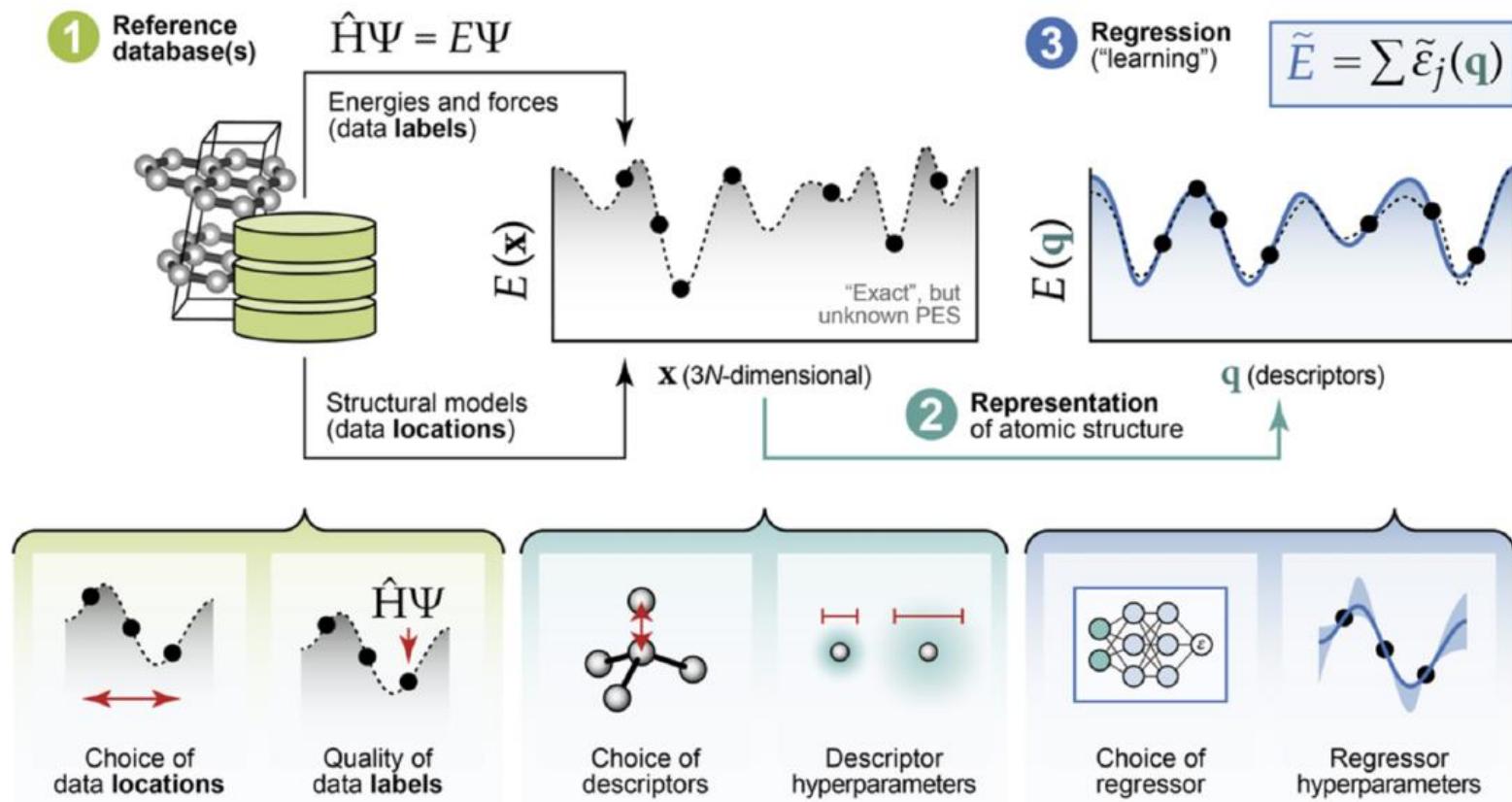


Multiscale modeling of materials augmented by AI



Machine learning potentials

- **Objectif** : simuler un système de N atomes en interaction
- **Calculs de référence** : DFT (Density Functional Theory) = très couteux
- **Idée** : générer une base de données de calculs DFT (énergie totale et forces) sur laquelle on va entraîner un potentiel machine learning



R. Jacob et al., Current Opinion in Solid State and Materials Science 35 (2025) 101214

Perspectives : prédiction de nouveaux matériaux par l'IA

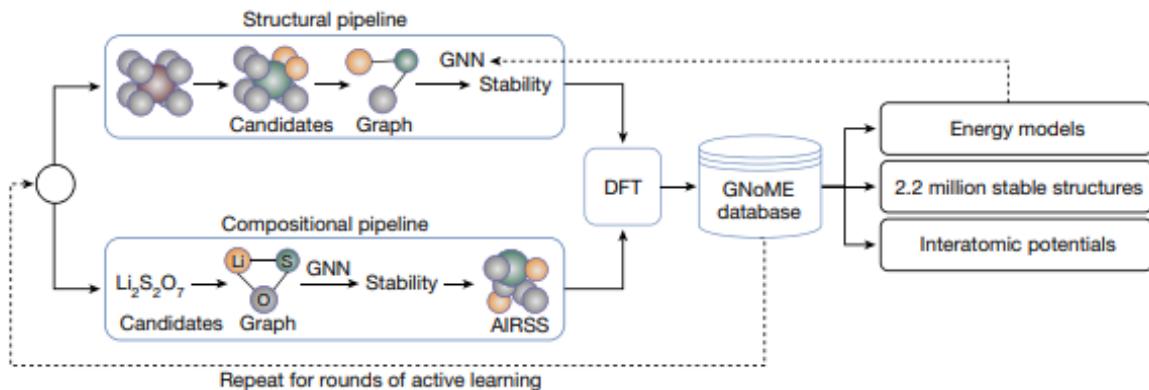
Scaling deep learning for materials discovery

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9> Amil Merchant^{1,2}, Simon Batzner^{1,3}, Samuel S. Schoenholz^{1,3}, Murathan Aykol¹, Gowoon Cheon² & Ekin Dogus Cubuk^{1,2}

Received: 8 May 2023

1. Google DeepMind, Mountain View, CA, USA
2. Google Research, Mountain View, CA, USA

Nature **624**, 80 (2023)



A generative model for inorganic materials design

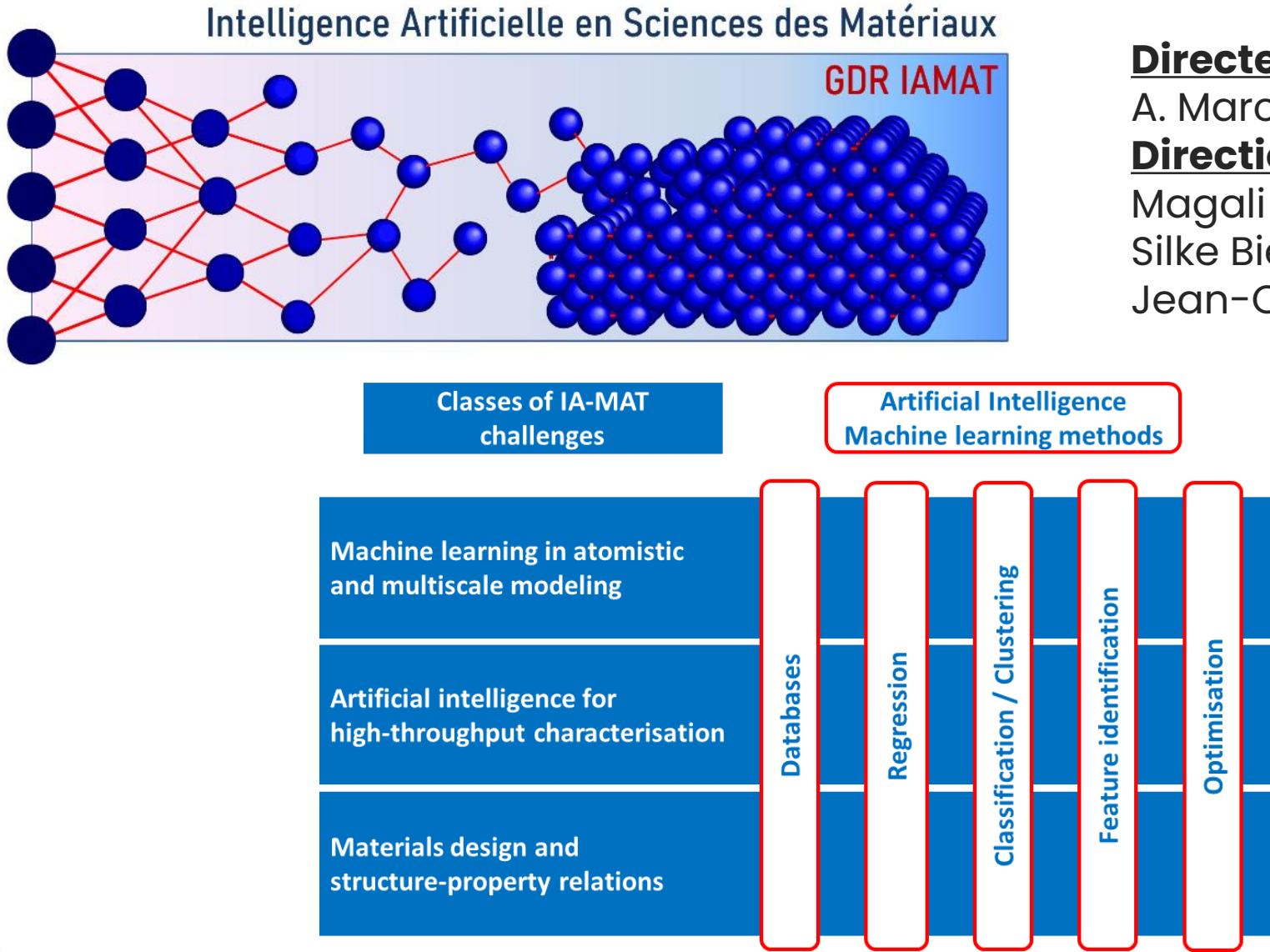
<https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5> Claudio Zeni^{1,2}, Robert Pilsler^{1,2}, Daniel Zögner^{1,2}, Andrew Fowler^{1,2}, Matthew Horton^{2,3}, Xiang Fu¹, Zilong Wang⁴, Aliaksandra Shysheya¹, Jonathan Crabbe¹, Shoko Ueda¹, Roberto Sordillo¹, Lixin Sun¹, Jake Smith², Bichlien Nguyen², Hannes Schutz², Sarah Lewis¹, Chin-Wei Huang², Ziheng Lu⁵, Yichi Zhou⁷, Han Yang⁶, Hongxia Hao⁶, Jielan Li⁶, Chunlei Yang⁴, Wenjie Li¹, Ryota Tomioka^{1,6,8} & Tian Xie^{1,8,9}

Microsoft Research AI for Science
Nature **639**, 624 (2025)

ENTALPIC

AI-driven materials discovery for
more sustainable industries

GDR IAMAT (2022-2026)



Directeur

A. Marco Saitta (IMPMC – Paris)

Direction adjointe

Magali Benoit (CEMES – Toulouse)

Silke Biermann (CPhT – Palaiseau)

Jean-Claude Crivello (ICMPE – Thiais)