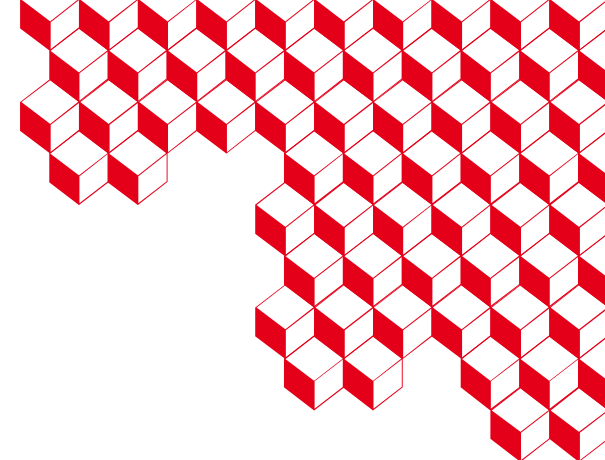
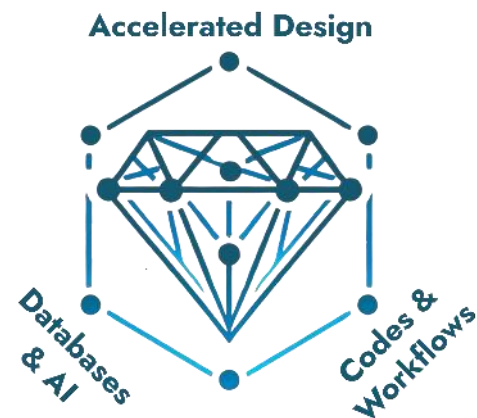




**DIAMOND**  
**ANR-22-PEXD-0015**



# **Rôle de l'IA dans le développement accéléré des matériaux**

**François WILLAIME**

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



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

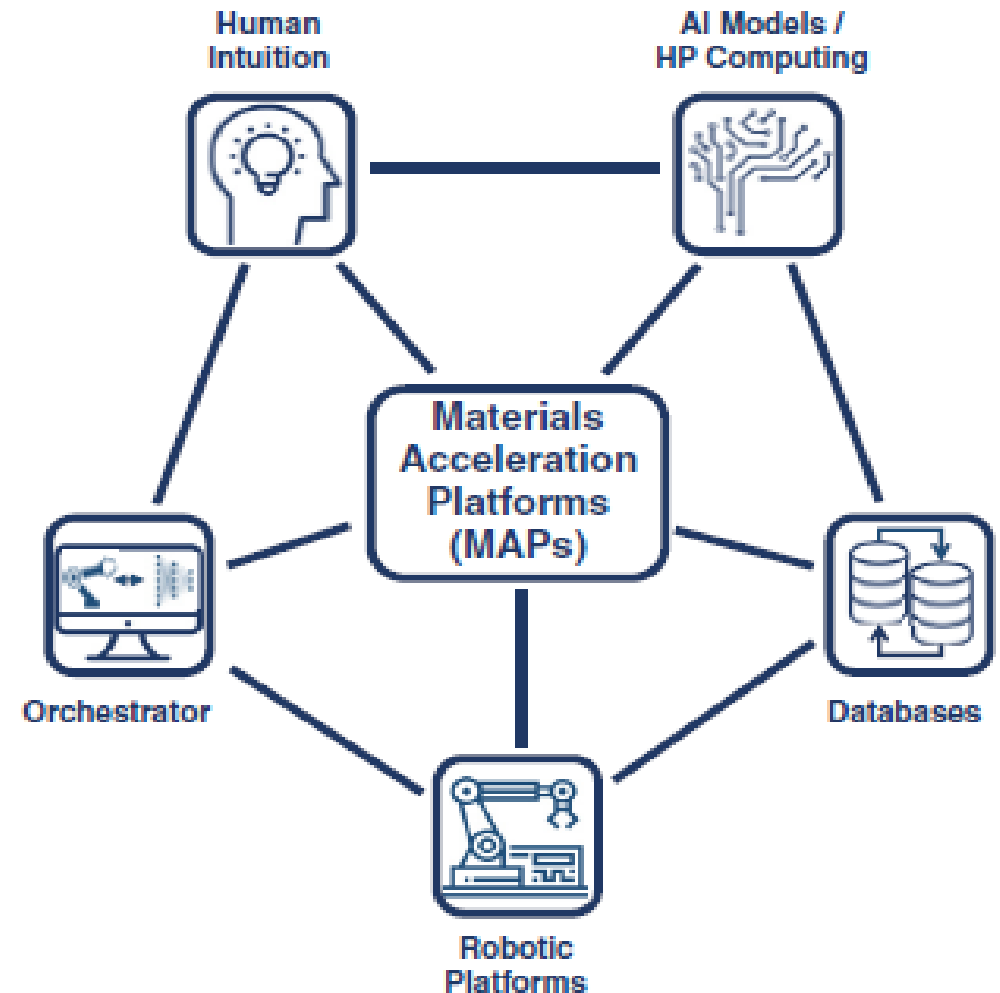
Dispositifs **I**ntégrés pour l'**A**ccélération du **D**éploiement de **M**atériaux **E**mergents  
*Discovery Acceleration for the Deployment of Emerging Materials*

*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)**

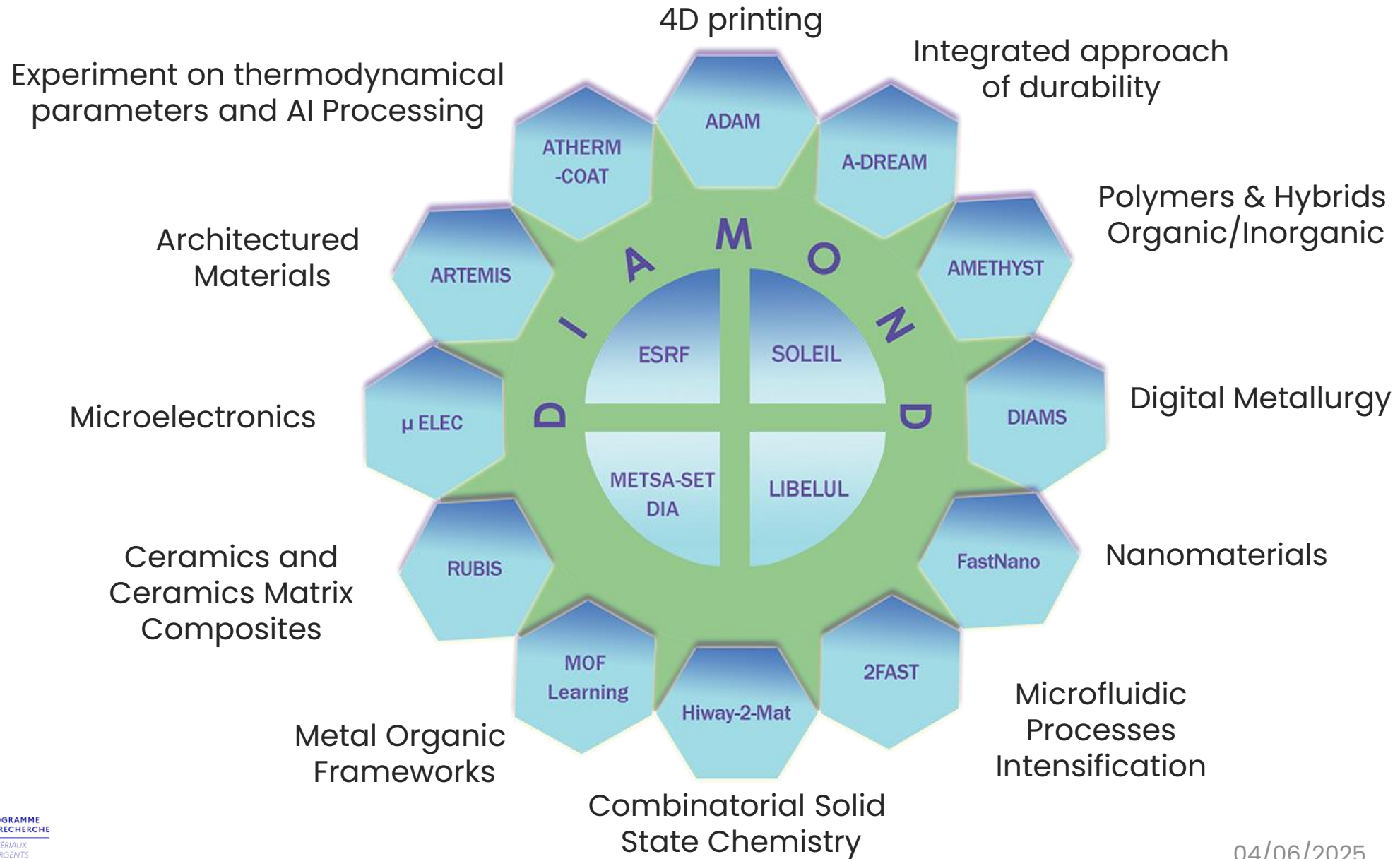
Programme et équipements prioritaires de  
recherche sur **le développement de matériaux  
innovants par l'intelligence artificielle**

Piloté par

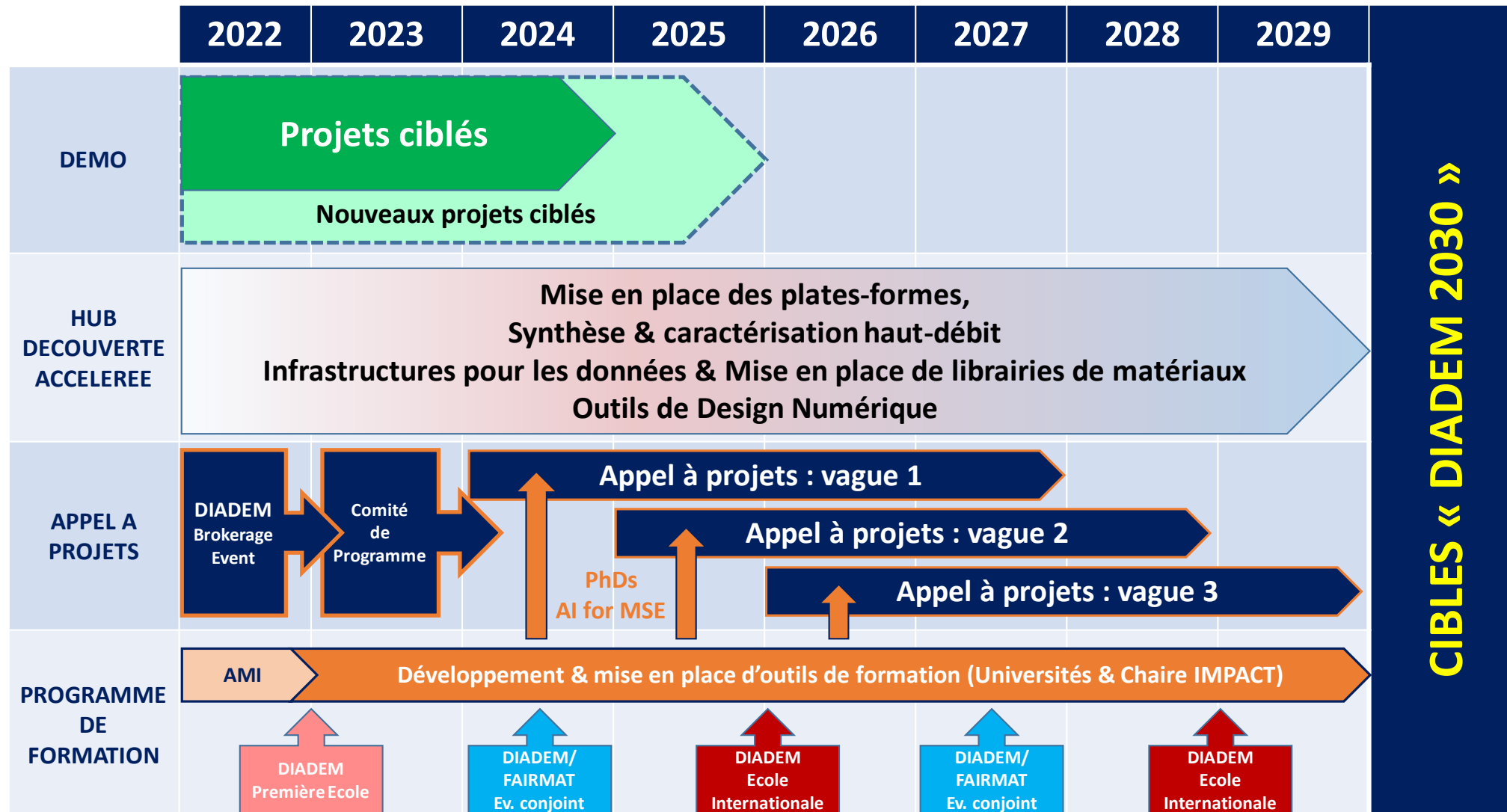


**Budget : 84 M€ sur 8 ans (2022 – 2029)**

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



# Planning global du PEPR DIADEM



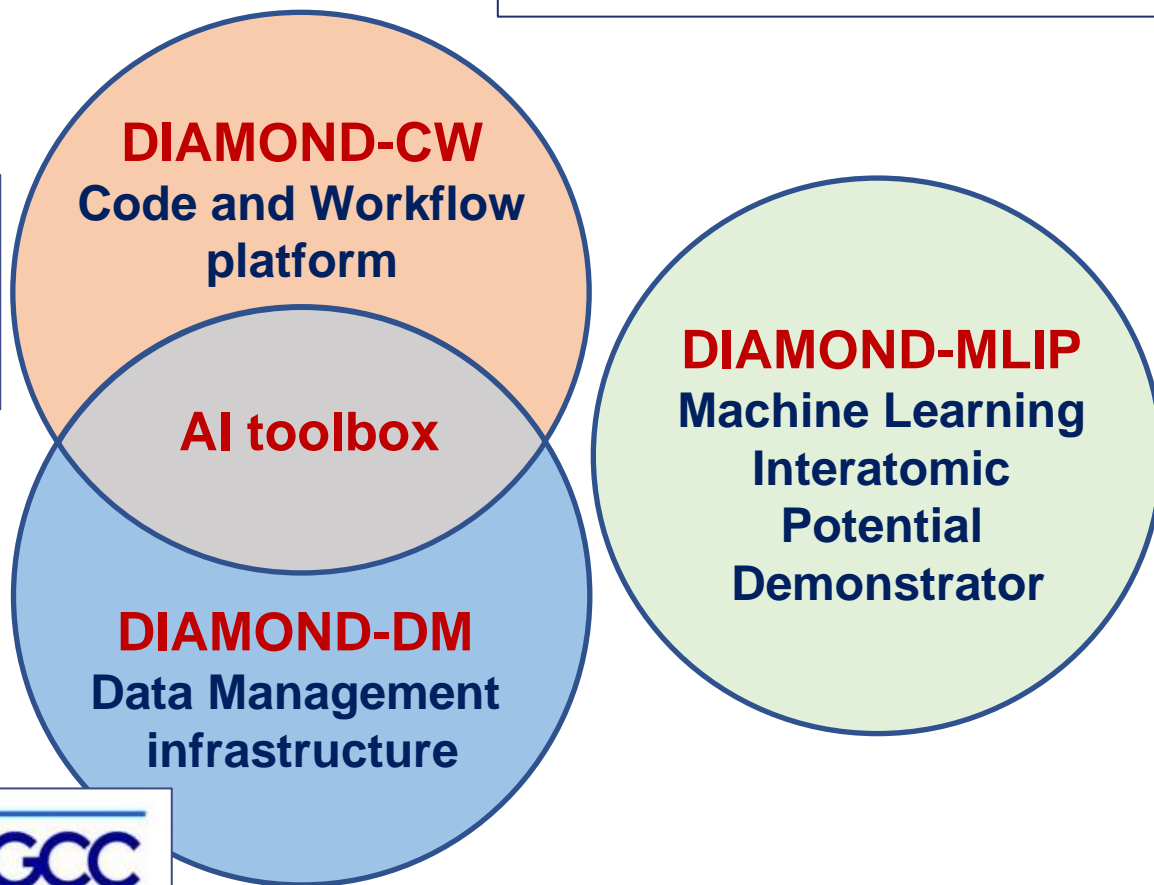




# DIAMOND digital platform



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



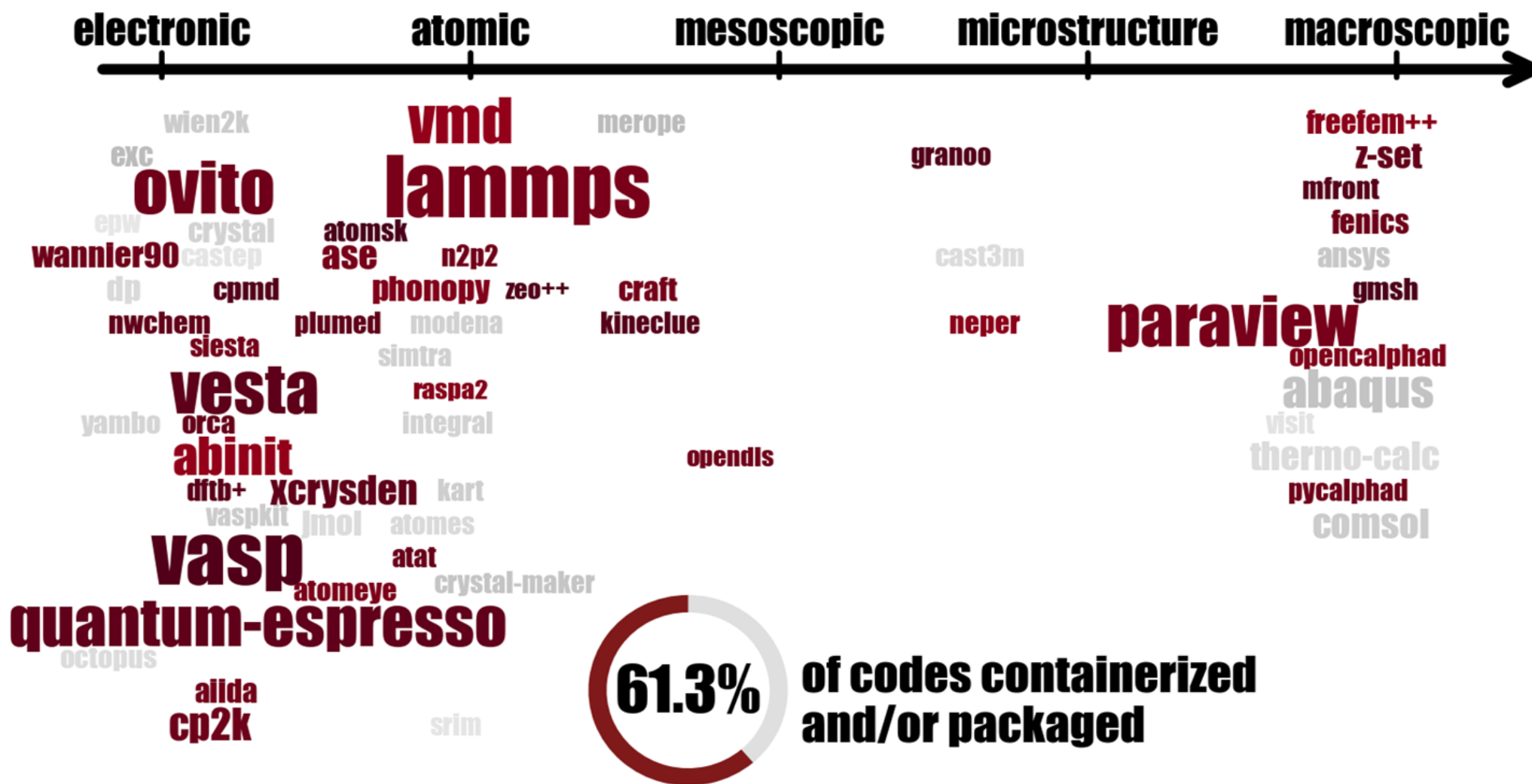
<https://diamond-diadem.github.io/>

## 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

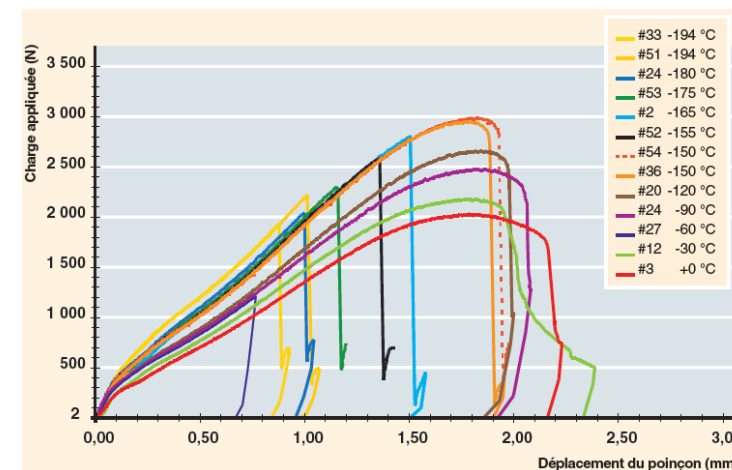
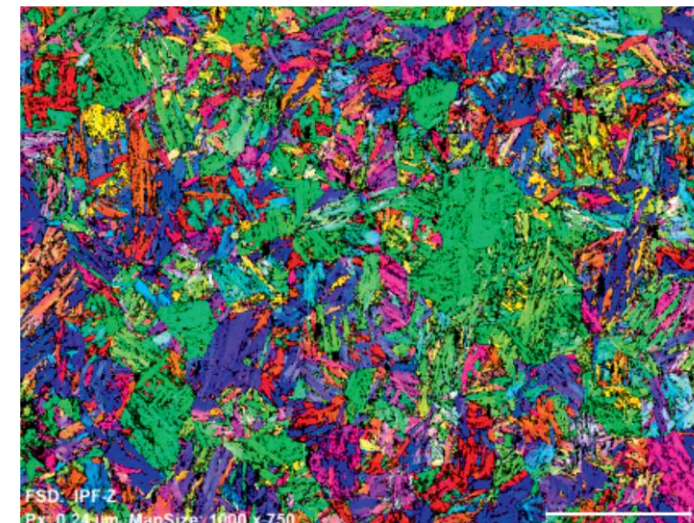






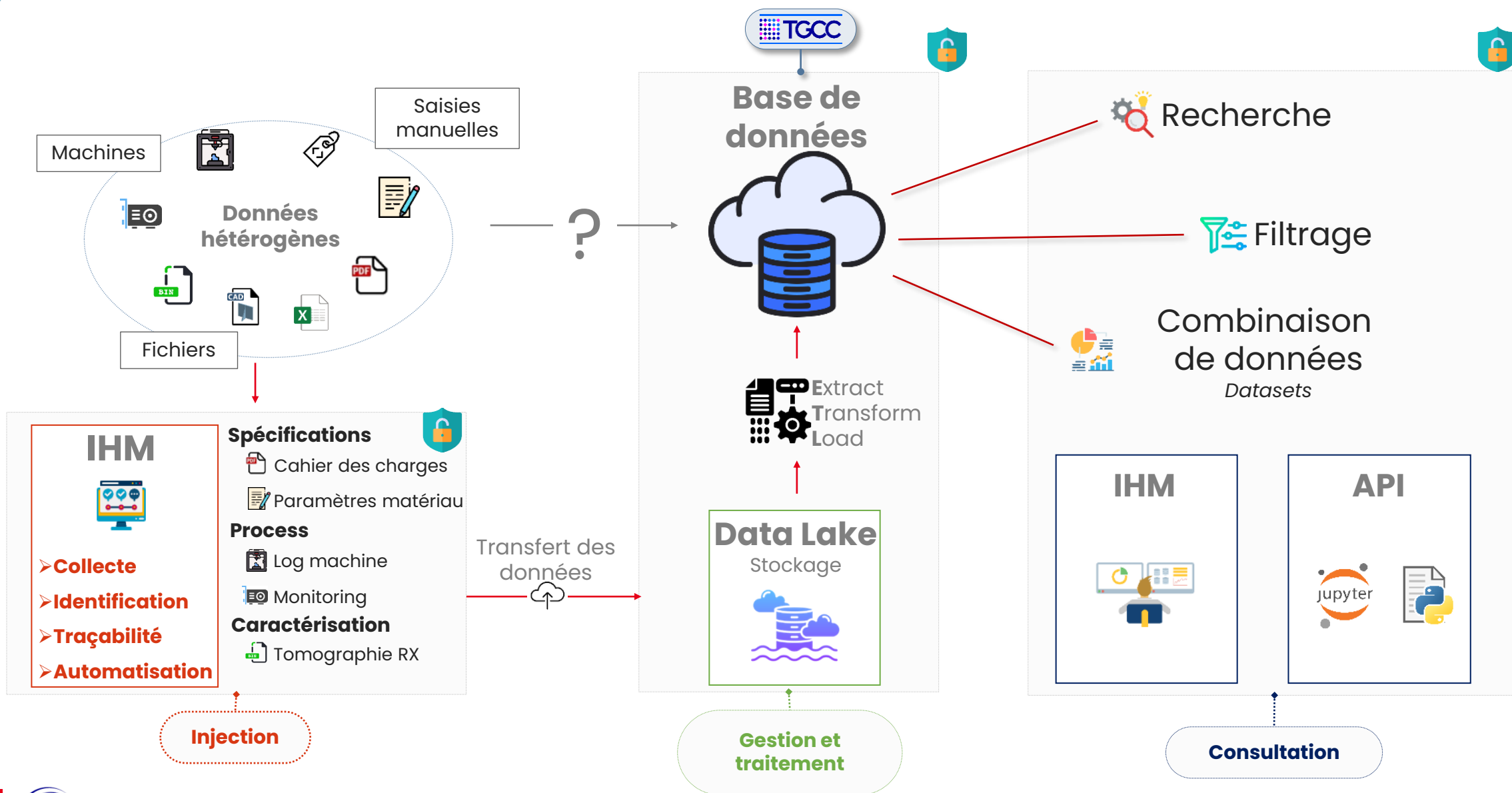
# DIAMOND-DM : Data management infrastructure

- **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



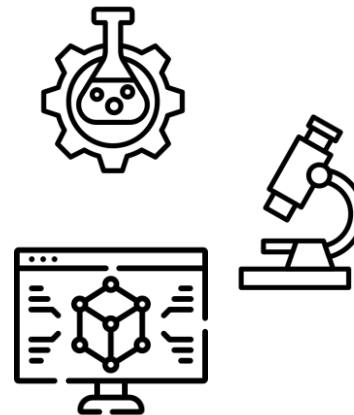


# Architecture (développement en cours)



# ■ Quelques exemples d'utilisation de l'IA

- Synthèse
- Caractérisation
- Simulation





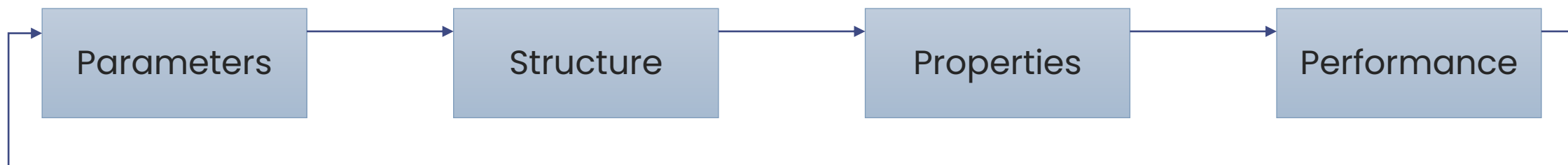
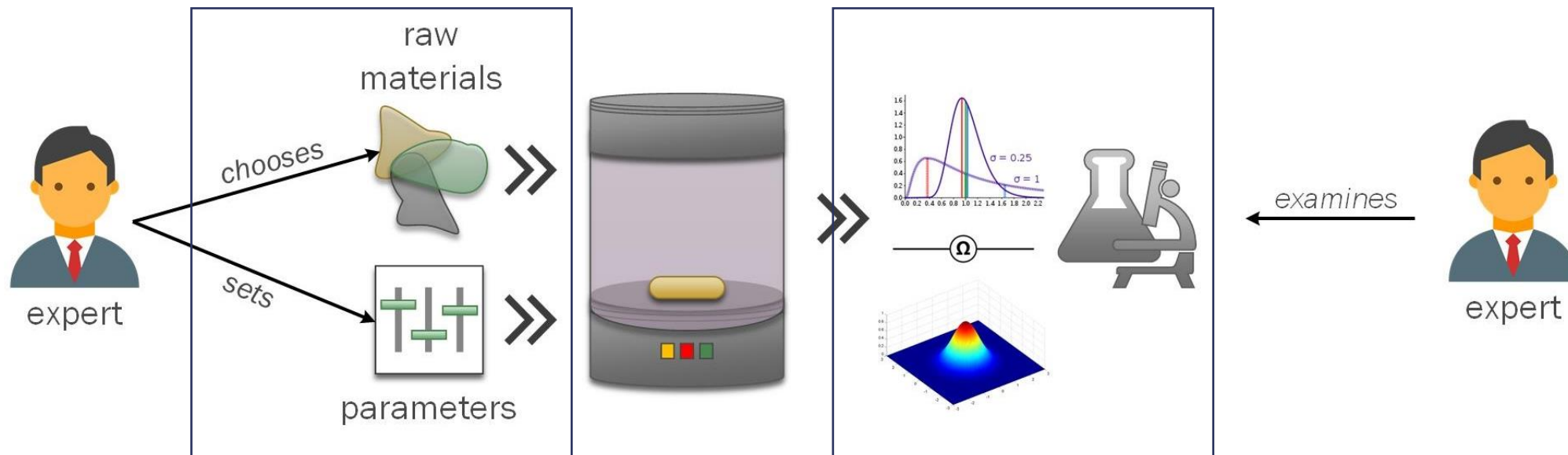
# Optimizing Experimental Design with AI



**ExpressIF** Materials<sup>®</sup> : explainable artificial intelligence as a virtual companion

Predicts the next experiment

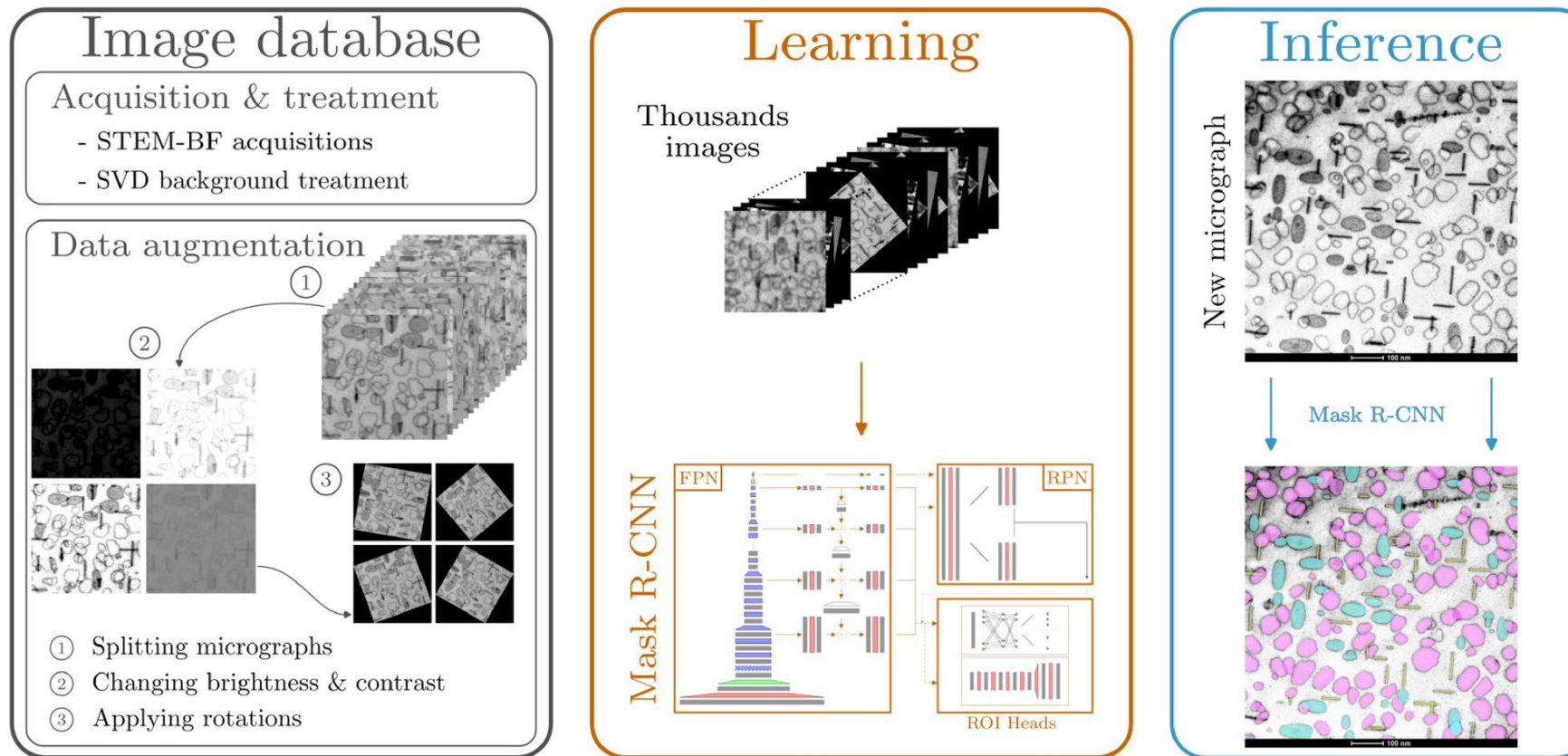
Predicts the properties



Recommends the next experiment to perform

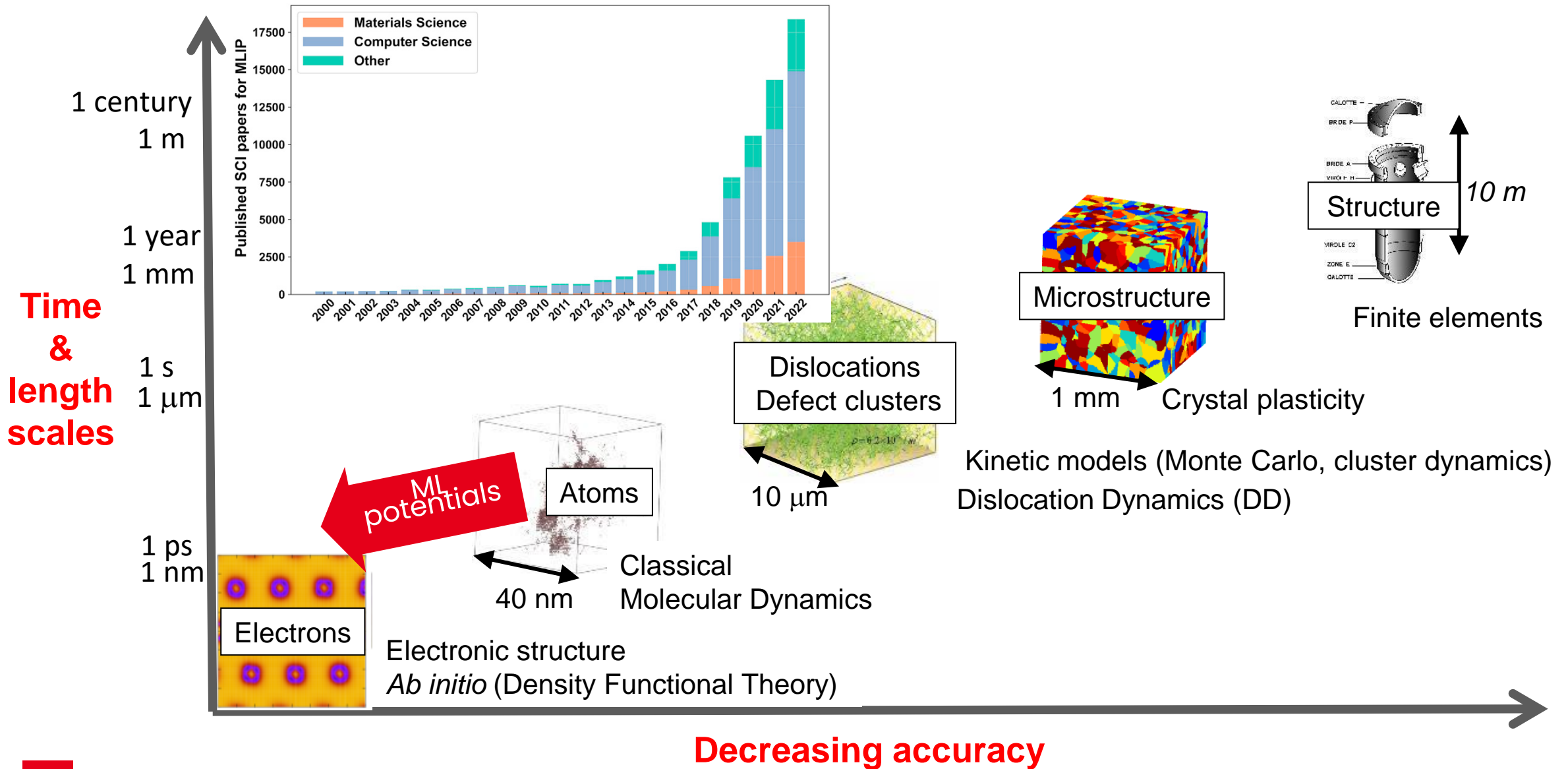
# Improving efficiency and accuracy of materials characterisation through AI-driven data analysis and interpretation

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





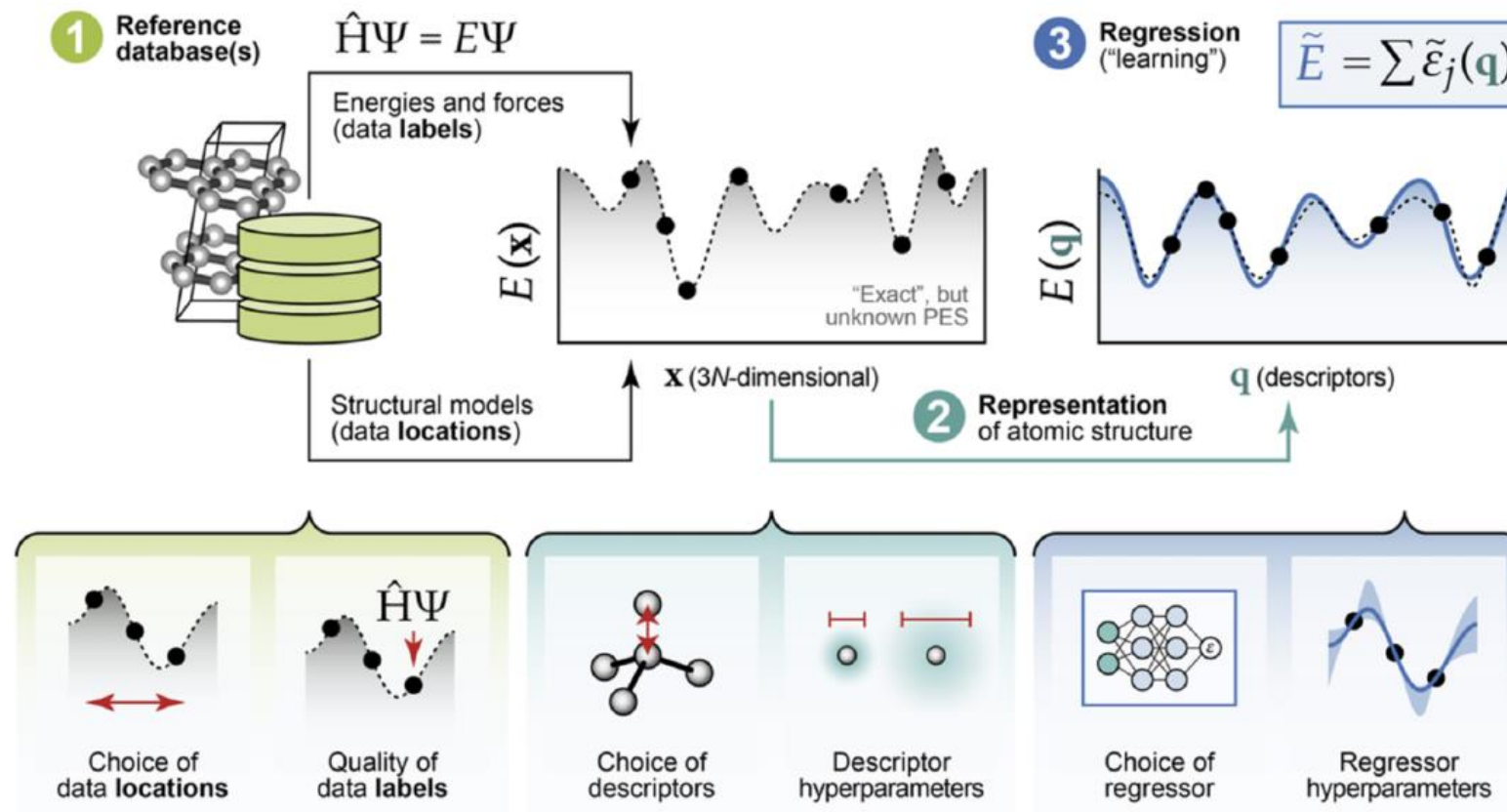
# Multiscale modeling of materials augmented by AI





# Machine learning potentials

- **Objectif** : simuler un système de N atomes en interaction
- **Calculs de référence** : DFT (Density Functional Theory) = très coûteux
- **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

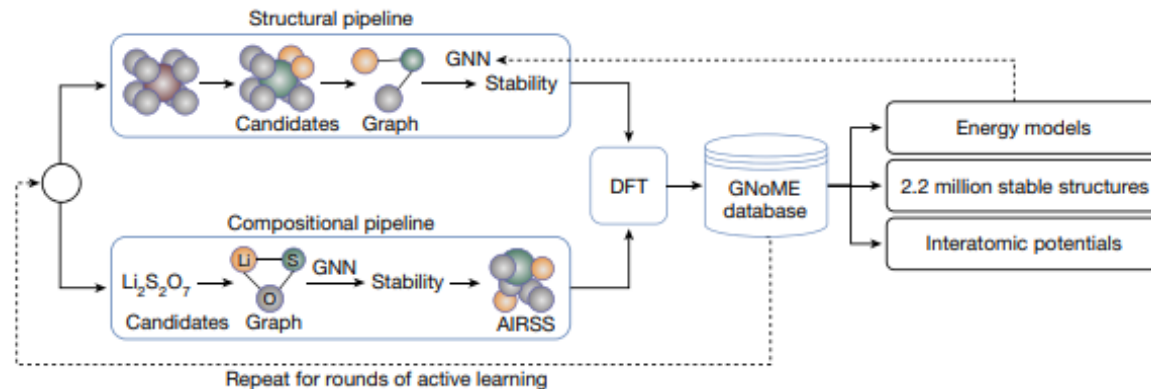
## Scaling deep learning for materials discovery

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>

Amil Merchant<sup>1,2,✉</sup>, Simon Batzner<sup>1,2</sup>, Samuel S. Schoenholz<sup>1,2</sup>, Muratahan Aykol<sup>1</sup>,  
Gowoon Cheon<sup>2</sup> & Ekin Dogus Cubuk<sup>1,2,✉</sup>

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>

Received: 17 January 2024

Accepted: 10 January 2025

Published online: 16 January 2025

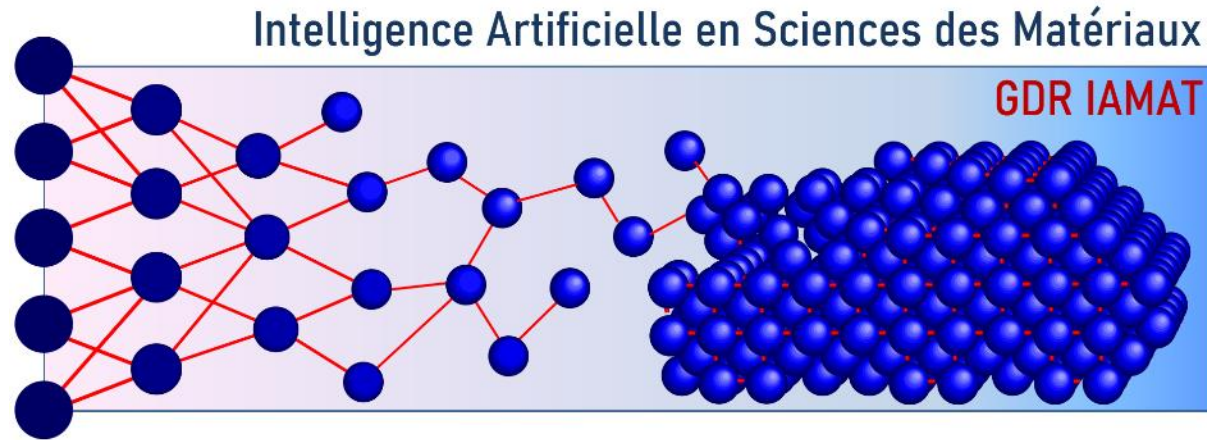
Claudio Zeni<sup>1,2</sup>, Robert Pinsler<sup>1,2</sup>, Daniel Zögner<sup>2,3</sup>, Andrew Fowler<sup>1,2</sup>, Matthew Horton<sup>2,3</sup>,  
Xiang Fu<sup>1</sup>, Zilong Wang<sup>4</sup>, Aleksandra Shysheya<sup>1</sup>, Jonathan Crabbe<sup>1</sup>, Shoko Ueda<sup>1</sup>,  
Roberto Sordillo<sup>1</sup>, Lixin Sun<sup>1</sup>, Jake Smith<sup>2</sup>, Bichlien Nguyen<sup>2</sup>, Hannes Schütz<sup>2</sup>, Sarah Lewis<sup>1</sup>,  
Chin-Wei Huang<sup>5</sup>, Ziheng Lu<sup>6</sup>, Yichi Zhou<sup>7</sup>, Han Yang<sup>8</sup>, Hongxia Hao<sup>6</sup>, Jielan Li<sup>6</sup>,  
Chunlei Yang<sup>4</sup>, Wenjie Li<sup>4</sup>, Ryota Tomioka<sup>1,2,3,✉</sup> & Tian Xie<sup>1,2,3,✉</sup>

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)

