

LUNDI 22 MAI 2023

8H45 - 12H30

AMPHI HERVÉ DANIEL  
(BÂT. 670, HENRI MOISSAN)



# MATINÉE SIMULATION PREDICTION & INTELLIGENCE ARTIFICIELLE EN CHIMIE

Présentation d'activités de recherche, d'outils et d'instruments par des chercheurs, enseignants-chercheurs, étudiants et industriels.

Inscription obligatoire :  
<https://tinyurl.com/yckdh9va>





# PROGRAMME



**8h45 Accueil**

**9h Michel Guidal** – Vice-président adjoint recherche et valorisation – Université Paris-Saclay  
Introduction et présentation du Mésocentre

**9h15 Pablo Piantanida** – McGill University/Université Paris-Saclay  
Titre à venir

**9h45 Federica Agostini** – ICP – Université Paris-Saclay  
Ultrafast excited-state dynamics in molecules: From quantum to quantum-classical dynamics

**10h05 Jessica Andreani** – I2BC – Université Paris-Saclay  
Intelligence artificielle pour la prédiction de structure tridimensionnelle des macromolécules biologiques

**10h25 Nicolas Ferey** – LRI – Université Paris-Saclay  
Les simulations moléculaires interactives, entre l'interaction humain machine, la représentation des connaissances, et la biochimie théorique

**Pause 15 min**

**11h Communications Flash de doctorants**

**Elsa Denakpo** – ICSN – Université Paris-Saclay  
Chemistry-aware prediction of antibiotic resistance from genomic data using machine learning and deep learning approaches

**Zixing Qiu** – ISMO/MICS – Université Paris-Saclay  
Determination of optimal molecular representations for deep learning

**Xuwen Xiao** – ISMO/MICS – Université Paris-Saclay  
Automatic preparation of a chemical database for the training of a deep learning agent

**11h10 Claire Nédellec** – MaIAGE – INRAE  
Institut DATAIA, l'Institut d'IA de l'Université Paris-Saclay

**11h30 Nicolas Sabouret** – GS ISN – Université Paris-Saclay  
La recherche en informatique, qu'est-ce que c'est ?

**11h50 Yann Leconte** – NIMBE – CEA  
Vers l'accélération de la découverte de nanomatériaux innovants grâce à l'IA : le projet ciblé FastNano du PEPR Diadem

**12h10 Maximilien Levesque** – AQEMIA  
Overview about AQEMIA, a spin-out from ENS-PSL and CNRS: How we fuel a generative AI with atomistic physics to discover new therapeutic molecules

**12h30 Aurélien Alix et Fabienne Testard** – GS Chimie  
Bilan et perspectives

**Suivi d'un déjeuner**

