

Matinée Simulation, Prédiction et Intelligence artificielle



La GS Chimie a organisé le 22 mai 2023 une matinée sur l'utilisation des sciences du numérique en chimie.

L'objectif de cette première matinée était de présenter des activités de recherche, des outils et des instruments à l'interface entre chimie et informatique.

L'évènement a attiré 120 participants, parmi des chercheurs, enseignants-chercheurs et personnels de l'Université mais également des étudiants en doctorat et en master.



M. Guidal

M. Guidal, vice-président adjoint recherche et valorisation a débuté cette première session avec la présentation du mésocentre suivi de P. Piantanida, professeur à l'Université McGill au Canada et chercheur au CNRS, pour celle de ses activités de recherche.

Plusieurs chercheurs des GS ISN et Chimie dont N. Ferey (LRI-ISN), N. Sabouret (Dir. GS ISN), F. Agostini (ICP), J. Andreani (I2BC) ont contribué sur le volet activités de recherche. L'institut DATAIA et le projet FastNano du PEPR Diadem ont également été présentés à l'auditoire par C. Nédellec (INRAE) et Y. Leconte (CEA).



N. Ferey

L'enquête réalisée à la suite de cette matinée a permis de confirmer l'enthousiasme des chimistes, étudiants et chercheurs, pour les outils informatiques permettant d'optimiser leur travail. Elle a également permis d'identifier une demande forte pour intégrer les aspects formation à et par à l'intelligence artificielle dans les évènements à venir sur ce thème.

Retrouvez [ICI](#) quelques-unes des présentations, et le programme complet de la matinée dans les actus de la GS [ICI](#).



M. Levesque

Trois doctorants ont présentés leurs travaux de thèse sur l'utilisation du *machine learning* en chimie lors de communications flash. Un témoignage de la société Aqemia a clôturé la journée sur le bénéfice de l'utilisation de l'IA pour l'industrie pharmaceutique.