



Informatique des matériaux : comment combiner la puissance des calculs ab initio à haut débit et l'intelligence artificielle ?

Prof. Gian Marco RIGNANESE

Université Catholique de Louvain, Belgique

Les progrès des codes de simulation sur base des principes premiers (mécanique quantique et électromagnétisme sans recours aux données expérimentales) et des capacités des supercalculateurs ont donné naissance à l'approche dite des calculs ab initio à haut débit. Cette dernière a permis d'identifier de nombreux nouveaux composés pour diverses applications (par exemple, les batteries au lithium et les matériaux photovoltaïques). Suite à cela, un certain nombre de bases de données sont également devenues disponibles en ligne, donnant accès à diverses propriétés des matériaux, principalement pour des propriétés assez simples à calculer. En effet, pour des propriétés plus complexes (par exemple, des réponses linéaires ou d'ordre supérieur), l'approche à haut débit est toujours hors de portée en raison du temps de calcul requis. Pour surmonter cette limitation, les approches basées sur l'intelligence ont récemment attiré beaucoup d'attention dans le cadre de la conception de matériaux. Dans cet exposé, je passerai en revue les progrès récents dans le domaine émergent de l'informatique des matériaux qui combine la puissance des calculs ab initio à haut débit et l'intelligence artificielle.