INTRODUCTION AU MACHINE LEARNING APPLIQUÉ À LA CROISSANCE DE MATÉRIAUX

Sylvain LE TONQUESSE
CR CNRS, équipe Cristallographie et physique de la matière
Membre du COPIL du réseau CRISTECH
Laboratoire CRISMAT, UMR6508
6 Boulevard du Maréchal Juin
F-14050 CAEN cedex 4 France

Mercredi 10 décembre 2025 à 14 h 00
Bâtiment Fermat, amphi I

(English below)

Cette présentation introduira les principes fondamentaux du machine learning appliqué à la chimie des matériaux, en soulignant à la fois ses capacités et ses limites dans un contexte expérimental. Un accent particulier sera mis sur les méthodes d'optimisation, notamment l'optimisation bayésienne, qui se prête particulièrement bien à l'exploration de systèmes chimiques complexes. L'exposé montrera comment ces approches permettent d'orienter efficacement la recherche expérimentale, en donnant des exemples

concrets liés à la synthèse d’intermétalliques et à la croissance de couches minces. L’ ensemble mettra en évidence la manière dont ces outils peuvent contribuer à accélérer la mise au point de matériaux aux propriétés ciblées.

This presentation introduces the fundamental principles of machine learning as applied to materials chemistry, emphasizing both its potential and its limitations within an experimental framework. Particular attention will be devoted to optimization strategies, with a focus on Bayesian optimization, which proves especially effective for the exploration of complex chemical systems. The lecture will illustrate how such approaches can efficiently guide experimental research, drawing on concrete examples from the synthesis of intermetallic compounds and the growth of thin films. Taken together, these elements will highlight the ways in which these tools can accelerate the development of materials with tailored properties.