Dr. Anne Michelin, Centre de Recherche sur la Conservation (CRC), *MNHN*

Sciences analytiques et patrimoine : Faire parler les manuscrits

Par leur connaissance des matériaux, les physico-chimistes peuvent apporter un nouvel éclairage sur les objets du passé. Les recherches possibles sont multiples et visent à mieux connaître et à mieux préserver les objets des collections patrimoniales et naturelles pour le futur. Des recherches appliquées impliquant une approche interdisciplinaire avec les sciences humaines côtoient des recherches fondamentales sur la compréhension des processus d'altération et le développement des méthodes de conservation et de restauration. Ces recherches passent par une étape de caractérisation de la composition chimique des matériaux en utilisant des méthodologies analytiques spécifiques qui seront décrites.

Le développement des analyses physico-chimiques sur les objets anciens est en grande partie dû aux progrès techniques accomplis ces dernières décennies sur les équipements de mesure. Le panel d'équipements scientifiques s'est aujourd'hui étendu à de nombreux appareils performants qu'il est possible d'emporter sur site.

Plusieurs exemples d'étude concernant les manuscrits anciens illustreront cette intervention : du Codex aztèque Borbonicus à la correspondance caviardée de Marie-Antoinette, deux exemples pour faire parler les matériaux afin de connaître les recettes de l'époque et aider les historiens dans la datation du document ou relire des textes dissimulés.

Analytical Sciences and Heritage: Making Manuscripts Speak

Through their knowledge of materials, physico-chemists can shed new light on objects from the past. The possible research avenues are numerous and aim to better understand and preserve objects from heritage and natural collections for the future. Applied research involving an interdisciplinary approach with the humanities intersects with fundamental research on understanding the processes of deterioration and the development of conservation and restoration methods. These research efforts involve a step of characterizing the chemical composition of materials using specific analytical methodologies that will be described.

The development of physico-chemical analyses on ancient objects is largely due to the technical advances made in measurement equipment in recent decades. The range of scientific equipment has now expanded to include many high-performance devices that can be taken to the site.

Several examples of studies involving ancient manuscripts will illustrate this presentation: from the Aztec Codex Borbonicus to the censored correspondence of Marie-Antoinette, two examples to extract information from the materials in order to understand the recipes of the time and assist historians in dating the document or deciphering concealed texts.

Pr. Marco Saitta, Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie, *SU, MNHN, CNRS, IRD*

Méthodes d'intelligence artificielle en science des matériaux computationnelle (et au-delà)

Ces dernières années, l'apprentissage automatique a transformé la recherche scientifique, grâce à la combinaison de la maturité de nombreuses approches et algorithmes, ainsi qu'à la croissance exponentielle de la puissance de calcul. Ces approches ont déjà eu un impact dramatique en science des matériaux computationnelle, et auront très probablement des répercussions énormes également

dans la caractérisation expérimentale de la matière et des matériaux : de la spectroscopie à l'imagerie, toute une gamme de méthodes basées sur l'exploitation de vastes bases de données a émergé. Lors de ce séminaire, j'introduirai les principes de base de l'apprentissage automatique, qui sont essentiels pour la bonne définition, l'optimisation, la validation et l'utilisation d'un modèle. Dans une deuxième partie, je présenterai quelques exemples d'approches d'apprentissage automatique dans les simulations atomistiques et dans la caractérisation expérimentale.

Artificial Intelligence methods in computational materials science (and beyond)

In recent years, machine learning has transformed scientific research, through the combination of the maturity of numerous approaches and algorithms, and the exponential growth of computing power. These approaches have already a dramatic impact in computational materials science, and will most likely have enormous impacts also in experimental characterization of matter and materials: from spectroscopy to imaging, a whole range of methods based on the exploitation of large databases has appeared. During this seminar, I will introduce the basic principles of machine learning, which are essential for the proper definition, optimization, validation, and use of a model. In a second part, I will present some examples of machine learning approaches in atomistic simulations, and in experimental characterization.

Pr. Bernold Hasenknopf, Institut Parisien de Chimie Moléculaire, *SU, CNRS*

Intégrité scientifique : ça me concerne ?

« Parvenue à l'issue de mon doctorat en 'Chimie des matériaux', et ayant ainsi pratiqué […] l'exercice d'une recherche scientifique exigeante […] dans le respect des principes de l'intégrité scientifique, je m'engage […] »

Chaque doctorant et doctorante jure au moment de la soutenance avoir pratiqué la recherche dans le respect de l'intégrité scientifique. Mais que veut dire cet engagement ? Cette présentation apporte quelques réponses à cette question.

Scientific Integrity: Does it concern me?

"Having completed my Ph.D. in 'Materials Chemistry' and thus having practiced [...] the demanding exercise of scientific research [...] in accordance with the principles of scientific integrity, I commit [...]"

At the time of their thesis defense, every doctoral candidate solemnly swears to have conducted their research in accordance with scientific integrity. But what does this commitment mean? This presentation provides some answers to this question.