

# PEPR BBEST

## Biomasses, biotechnologies et technologies durables pour la chimie et les carburants

### Journées outils numériques

18 novembre 2025

### Institut des Systèmes Complexes

113 rue Nationale, 75013 Paris

09:30 - 09:40 Mot d'ouverture

#### 09:40 - 11:00 MAMABIO

- 09:40 - 09:50 Contexte Mamabio amenant au développement des outils (Céline Chizallet)
- 09:50 - 10:25 Outil SpectroChemPy pour le traitement et l'analyse des données spectrales (Arnaud Travert)
- 10:25 - 11:00 Optimisation de Machine Learning potentials pour la dynamique moléculaire (Thomas Pigeon)

11:00 - 11:30 Pause

#### 11:30 - 12:30 AMARETTO

- 11:30 - 12:30 Contexte Amaretto et stratégie de fusion de données analytiques pour identifier les descripteurs de la réactivité enzymatique de la biomasse lignocellulosique (Aurélie Chataignon)

12:30 - 14:00 Déjeuner

#### 14:00 - 15:20 MuSiHC

- 14:00 - 14:30 Modèles hybrides Machine Learning/mécanistiques (Danilo Dursoniah)
- 14:30 - 15:00 Modélisation de réseaux métaboliques (Wolfram Liebermeister)
- 15:00 - 15:20 Stratégie de modélisation et optimisation en ligne planifiée pour les fermenteurs (César Aceves)

#### 15:20 - 15:40 Outils et ressources Galaxy (Valentin Loux)

15:40 - 16:00 Pause

#### 16:00 - 17:20 Galaxy-BioProd

- 16:00 - 16:20 Simulation de bioprocédés : de la modélisation physique à l'analyse du cycle de vie (Jérôme Morchain)
- 16:20 - 16:30 Méthodes numériques cas d'étude photobioréacteur (production asthaxantin) (Filipa Lopes / Cristian Puentes)
- 16:30 - 16:50 Standardisation de protocoles expérimentaux dans Galaxy pour faciliter la FAIRisation des données (Fanny Demange)
- 16:50 - 17:00 Outils d'ingénierie de souches microbiennes et de consortiums microbiens pour la bioproduction (Joan Hérisson)
- 17:00 - 17:20 Rétro-ingénierie de la représentation moléculaire ECFP (Philippe Meyer)

### Inscription

- jusqu'au 09/11/2025 pour les présentiels
  - jusqu'au 18/11/2025 pour les distanciels
- <https://sondages.inrae.fr/index.php/571864>

**INRAE**

### Contact

[guillaume.gricourt@inrae.fr](mailto:guillaume.gricourt@inrae.fr)  
[philippe.meyer@inrae.fr](mailto:philippe.meyer@inrae.fr)  
[jean-loup.faulon@inrae.fr](mailto:jean-loup.faulon@inrae.fr)

**anr** 

**ifp** *Energies  
nouvelles*

**FRANCE  
2030** 