

L'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE AU SERVICE DES CHIMISTES

• CHIMIE INFORMATIQUE



ULRICK RANDRIHARIMANAMIZARA est jeune chercheur à l'Institut de Chimie Moléculaire de l'Université Bourgogne Europe. Son équipe développe des outils informatiques pour aider les chimistes : cela permettrait de comprendre comment les molécules réagissent ou de prédire comment elles vont réagir entre elles. Ulrick est chargé de créer un modèle basé sur l'intelligence artificielle pour déterminer quelles seraient les meilleures conditions pour qu'une réaction chimique se fasse au mieux.

« J'ai toujours été fasciné par la chimie, où en manipulant la matière, on peut produire des médicaments ou d'autres matériaux utiles. Et aujourd'hui, on peut aussi y contribuer juste avec un ordinateur ! Avec l'intelligence artificielle, j'espère pouvoir créer un outil informatique qui va faciliter le travail des chimistes et accélérer les nouvelles découvertes. »

Ulrick Randriharimanamizara

Une réaction chimique est le fait de mélanger différentes molécules, appelées « réactifs », pour en créer une ou plusieurs nouvelles, nommées « produits ». Mais pour que la réaction permette de fabriquer une grande quantité de produits, il faut déterminer plein de critères, comme par exemple à quelle température il faut mieux réaliser la réaction et s'il faut utiliser de l'eau ou d'autres choses pour l'accélérer. Malheureusement, trouver ces « bonnes conditions » prend souvent des semaines voire des mois, et nécessite beaucoup d'essais.

Pour gagner du temps, est-ce qu'on pourrait « simuler » les réactions chimiques sur ordinateur avant de les faire réellement au laboratoire ? C'est ce que cherche à faire Ulrick. Il développe un modèle d'intelligence artificielle qui pourrait réussir à prédire si une réaction chimique va donner un bon rendement ou pas, en fonction des conditions de l'expérience.

Pour commencer, Ulrick récupère des milliers d'informations sur les réactions chimiques réalisées dans

son laboratoire mais aussi ailleurs, qui indiquent les réactifs choisis et produits obtenus selon différentes conditions. Et à partir de cela, sur son ordinateur, il construit un grand tableau appelé “base de données” qui contient toutes ces informations.

Ensuite, il teste quatre modèles d'intelligence artificielle différents, pour leur faire « apprendre » chacune à simuler une réaction chimique et à reconnaître les meilleures conditions pour une réaction donnée. Après, il évalue et compare les modèles pour voir celui qui fait les prédictions les plus fiables.

Dans l'avenir, il espère pouvoir collaborer avec les chimistes de son laboratoire pour vérifier expérimentalement si les prédictions de son IA sont bien correctes.

Et finalement, il souhaite pouvoir donner accès à son modèle aux autres chimistes du monde entier.

LES OBJECTIFS

- ➔ Constituer une base de données de réactions chimiques
- ➔ Entraîner et évaluer des modèles d'intelligence artificielle pour prédire les rendements des réactions chimiques
- ➔ Tester les prédictions de l'IA au laboratoire de chimie et rendre les modèles accessibles à tous