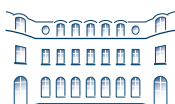


RECUEIL DES RÉSUMÉS



CHIMIE ET INTELLIGENCE ARTIFICIELLE

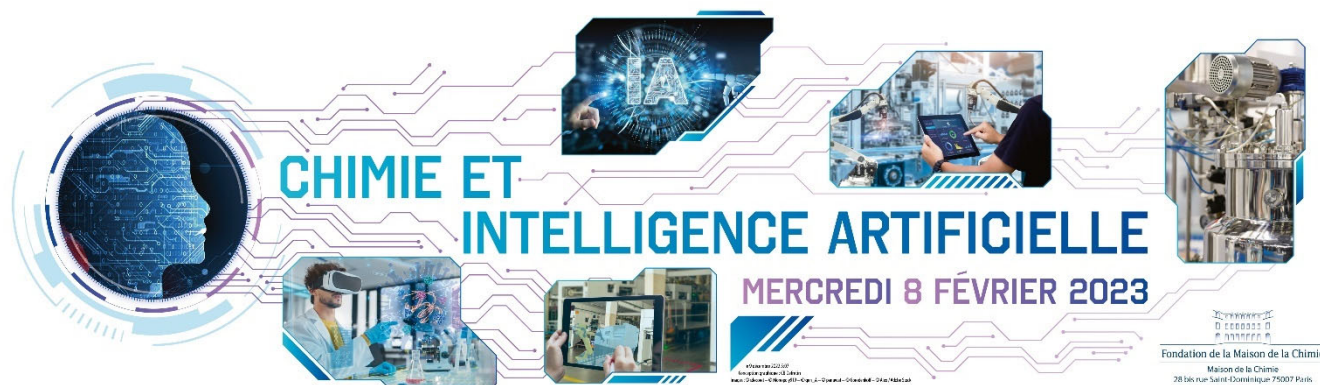
MERCREDI
8 FÉVRIER 2023



Fondation de la Maison de la Chimie

Maison de la Chimie
28 bis rue Saint-Dominique 75007 Paris

[https://actions.maisondelachimie.com/colloque/
chimie-et-intelligence-artificielle](https://actions.maisondelachimie.com/colloque/chimie-et-intelligence-artificielle)



RÉSUMÉS DE LA TABLE RONDE ET DES CONFÉRENCES

TABLE RONDE : Intelligence Artificielle et Industrie

Débats animés par **Marc J. LEDOUX**, avec la participation de :
(par ordre alphabétique des auteurs)

Amandine CUENCA

Un laboratoire connecté pour accélérer l'innovation en chimie.

Julien ROMESTANT

*IA et parfumerie cosmétique
nouvelles expérience client et réduction du time du market.*

Laurent SCHIO

De la sérendipité à l'intelligence artificiel en recherche pharmaceutique.

Pages

03

04

05

CONFÉRENCES :

(par ordre alphabétique des auteurs)

Pages

Carlo ADAMO

06

L'Intelligence Artificielle comme moteur dans la recherche en Chimie.

Sylvie BÉGIN-COLIN - Loïc JIERRY

07

Présentation de la Majeure Chimie@IA de l'ECPM - Description de l'apport de l'IA pour la préparation et la caractérisation des matériaux pour la santé.

François-Xavier COUDERT

08

Introduction aux méthodes d'apprentissage en chimie.

Guillaume FAYET

09

Intelligence Artificielle et nouvelles approches méthodologiques pour la maîtrise des risques industriels.

Stéphane GORSSE

10

La transition énergétique, un accélérateur de notre dépendance aux métaux stratégiques.

Mario MAGLIONE

11

Le projet DIADEM : accélérer la découverte de nouveaux matériaux grâce à l'IA.

Sébastien PREYS

12

L'expérience d'ONDALYS dans la formation continue aux outils opérationnels de la Chimiométrie et du Machine Learning.

Gian-Marco RIGNANESE

13

Les céramiques et les réfractaires indispensables à l'industrie primaire.

Cédric VILLANI

14

Intelligence artificielle pour la science et l'industrie.

TABLE RONDE animée par **Marc J. LEDOUX**

Intelligence Artificielle et Industrie

(par ordre alphabétique des auteurs)

Un laboratoire connecté pour accélérer l'innovation en chimie.

Amandine CUENCA

Manager d'équipe de Recherche - Solvay Laboratoire du Futur, Bordeaux

En tant que chimistes, l'Intelligence Artificielle (IA) est une opportunité. Elle pourrait bouleverser nos méthodes de travail. L'IA permet la conception de modèles prédictifs, qui guident les chercheurs dans leurs décisions, tel un GPS pour les navigateurs que nous sommes.

Ces algorithmes d'apprentissage intelligents sont spécifiques à chaque question scientifique. Ils sont entraînés avec nos bases de données historiques.

Ainsi, automatisation et robotique sont des atouts incontestables pour l'acquisition de bases de données structurées de grande ampleur.

De nouvelles compétences sont à acquérir. Vient alors une étroite collaboration entre chimistes et spécialistes de l'IA. Nous verrons dans cet exposé plusieurs illustrations de la puissance des algorithmes de machine learning pour accélérer la recherche de nouvelles molécules ou voies de synthèse et ainsi dessiner la chimie de demain : une chimie durable.

IA et parfumerie cosmétique, nouvelles expériences client et réduction du « time to market ».

Julien ROMESTANT

Cosmetic Valley, Chartres

L'Intelligence Artificielle est une révolution industrielle qui ouvre de nombreuses possibilités pour le secteur de la parfumerie cosmétique. Grâce à ses algorithmes, elle permet d'automatiser la valorisation des données de production et des données clients pour proposer des approches nouvelles.

L'IA permet d'optimiser le choix de production des ingrédients, de réduire les délais de production et de proposer des innovations plus rapidement en faisant de la prédiction de l'activité des molécules grâce à l'exploitation des données de toxicologie déjà connues.

Pour les consommateurs, ces données sont le nouvel or noir de l'économie et pour la parfumerie cosmétique, elles concernent des données liées à leurs particularités biologiques (carnation de peau, degré de sécheresse ou d'hydratation, émotions, ...), mais aussi à son environnement (exposition au soleil, à la pollution, ...), et également à son mode de vie (alimentation, tabagisme, ...) qui peuvent avoir un impact sur l'évolution de la peau.

L'exploitation de ces données ouvre la voie pour une cosmétique personnalisée et une expérience client renouvelée qui intègre également l'analyse des émotions et les particularités de chacun. Cette nouvelle offre repose sur des objets connectés, ou des smartphones qui permettent de tester ces paramètres biologiques et environnementaux. À partir des données récoltées, il est alors possible de réaliser des formules à la demande en fonction du besoin immédiat et des particularités de chacun.

Mots Clés : Parfum, Cosmétique, Intelligence artificielle, Personnalisation, Expérience client.

De la sérendipité à l'Intelligence Artificielle en recherche pharmaceutique.

Laurent SCHIO, Jean-Philippe RAMEAU

Sanofi, Recherche, plateforme Integrated Drug Discovery, Vitry sur seine

L'histoire de la découverte de nombreux médicaments fait état d'observations inattendues, d'erreurs qui ont engendré des résultats positifs, d'exploitations de phénomènes et de produits naturels qui ont été modulés ensuite par des processus de transformation chimique longs et fastidieux.

Dans les dernières décennies, la productivité de la recherche pharmaceutique a été grandement améliorée grâce à une meilleure connaissance des processus biologiques responsables du développement de maladies mais aussi des propriétés de drugabilité qu'il est nécessaire de respecter pour pouvoir tester les nouveaux principes actifs dans des modèles pharmacologiques précliniques, chez les patient.es et proposer un nouveau traitement thérapeutique qui soit efficace et bien toléré.

Le processus de la recherche de nouveaux médicaments est désormais très complexe car de nombreux tests doivent être réalisés afin de satisfaire au cahier des charges requis pour la mise en développement. Ainsi des milliers voir des millions de données sont générés au grès des différents projets et capturées dans des bases de données internes voir publiques.

Aujourd'hui, nous utilisons les grandes capacités de calcul d'ordinateurs, des algorithmes d'*intelligence artificielle* et de *machine learning* de plus en plus performants (prédictifs) pour analyser ce grand volume de données et d'informations disponibles pour *designer* plus rapidement des meilleurs candidats au développement clinique. Chez Sanofi, l'émergence de l'intelligence artificielle au profit des projets de recherche se fait grâce à des développements internes (thèses, formations) mais également via des collaborations avec des acteurs majeurs dans le domaine.

Mots Clés : Recherche, Productivité, Intelligence Artificielle, Design.

CONFÉRENCES PLENIÈRES ET SESSIONS PARALLÈLES

(par ordre alphabétique des auteurs)

L'Intelligence Artificielle comme moteur dans la recherche en Chimie.

Carlo ADAMO^{a,b}

^a Chimie ParisTech, PSL Research University, CNRS,
Institute of Chemistry for Health and Life Sciences, Paris

^b Institut Universitaire de France, Paris

Les approches *in silico* exploitant l'énorme potentiel de l'Intelligence Artificielle (IA) sont de plus en plus utilisées par les chimistes dans leurs travaux de recherche, qu'il s'agisse de guider la synthèse chimique, d'optimiser les paramètres d'une expérience ou d'accélérer la découverte de médicaments, pour ne citer que quelques applications très différentes. Développées à l'origine pour améliorer l'exploration de l'espace chimique (moléculaire) et apporter des réponses plus rapides aux problèmes chimiques étudiés, l'IA et les techniques connexes commencent à impulser activement la recherche et le développement en Chimie. Dans cet exposé, nous décrirons les succès (et certains échecs) de l'application de l'IA à des domaines propres à la Chimie, de la Chimie organique à la Chimie médicinale. En particulier, nous tenterons de répondre à certaines questions récurrentes concernant non seulement la robustesse et la fiabilité des approches d'IA, mais aussi leur rôle dans les développements à venir et leur interaction avec la Chimie « traditionnelle », expérimentale ou non.

Mots Clés : Intelligence Artificielle, Chimie.

Présentation de la Majeure Chimie@IA de l'ECPM - Description de l'apport de l'IA pour la préparation et la caractérisation des matériaux pour la santé.

Loïc JIERRY^{a,b} et Sylvie BÉGIN-COLIN^{a,c},

^a Ecole Européenne de Chimie Polymères et Matériaux, Université de Strasbourg

^b Institut Charles Sadron (CNRS - UPR22)

^c Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg (UMR 7504) CNRS/Université de Strasbourg

Le métier d'ingénieur chimiste évolue et requière de nouvelles compétences pour répondre aux besoins des entreprises. En conséquence, les écoles adaptent régulièrement leurs formations. Grâce à une veille constante portant sur l'évolution des profils d'ingénieurs chimistes recherchés, à ses échanges réguliers avec ses alumnis, l'École Européenne de Chimie Polymères et Matériaux (ECPM), école d'ingénieurs de l'Université de Strasbourg, a relevé le besoin de former des ingénieurs chimistes disposant de connaissances et de compétences dans le domaine des sciences des données. À noter que cette expression est en accord avec les perspectives d'évolution du métier d'ingénieur décrit dans le rapport 2020 du Forum Économique Mondial de Davos et avec l'identification lors des discussions avec nos partenaires industriels comme ALYSOPHIL et les industriels du conseil de l'ECPM d'un besoin d'un profil d'ingénieur chimiste positionné au sein de l'entreprise entre les équipes de R&D ou de production, et celles des *data scientists*. Un ingénieur capable de parler un double langage, chimiste et à la fois compétent en intelligence artificielle (IA). Ainsi, l'ECPM a ouvert dès la rentrée 2019 une 5^{ème} Majeure intitulée « Chimie&IA ». La construction, l'organisation de cette Majeure ainsi que le profil des ingénieurs chimistes formés seront discutés lors de cette présentation.

En parallèle de l'utilisation grandissante d'IAs au sein des entreprises, on observe également l'émergence de ces nouveaux outils au sein des laboratoires de recherche. Deux exemples de développement en cours seront présentés. Un premier concerne l'élaboration de nanoparticules d'oxyde de fer théranostiques pour la nanomédecine, c'est-à-dire des nanoparticules capables de combiner, dans une formulation, diagnostic et thérapie pour un traitement efficace et personnalisé des cancers. Des nanoparticules de forme « plaquettes » se sont révélées très prometteuses pour combiner thérapie et diagnostic mais le rendement actuel de synthèse en nanoplaquettes n'est pas assez élevé et les paramètres de synthèse sont nombreux. Les conditions de synthèse pour obtenir un rendement élevé en nanoplaquettes ont été optimisées en utilisant des algorithmes d'intelligence artificielle. Le second exemple illustre l'apport de l'IA dans le domaine des biomatériaux supramoléculaires. La résolution de la structure nanofibrillaire de peptides auto-assemblés à partir d'images de cryo-microscopie électronique sera présentée.

Mots Clés : Chimie, Matériaux, Formation ingénieur chimiste, IA et nanostructures.

Introduction aux méthodes d'apprentissage en chimie.

François-Xavier COUDERT

Chimie ParisTech, PSL Research University, CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, Paris

La chimie est une discipline scientifique qui étudie la composition, la structure et les propriétés des matériaux, ainsi que les réactions chimiques qui ont lieu entre eux. Pour comprendre et prédire ces phénomènes, il est nécessaire de mettre en œuvre des méthodes d'apprentissage automatique, également appelées "*machine learning*" en anglais.

Lors de cette conférence, nous allons présenter les différentes méthodes d'apprentissage automatique qui peuvent être utilisées en chimie, ainsi que leurs avantages et limites. Nous verrons comment ces méthodes peuvent être utilisées pour résoudre des problèmes tels que la classification de molécules, la prédiction de propriétés physiques ou la découverte de nouvelles substances.

Nous aborderons également les différents types de données qui sont couramment utilisées en chimie, ainsi que les méthodes de préparation et de traitement de ces données. Enfin, nous discuterons des enjeux éthiques et sociaux liés à l'utilisation de ces techniques en chimie, et des défis à relever pour leur déploiement à grande échelle.

Références :

- N. Artrith, K. T. Butler, F.-X. Coudert, S. Han, O. Isayev, A. Jain and A. Walsh, "Best practices in machine learning for chemistry", *Nature Chemistry*, 2021, 13 (6), 505-508.
- S. Chibani and F.-X. Coudert, "Machine learning approaches for the prediction of materials properties", *APL Materials*, 2020, 8 (8), 080701.
- Chloé-Agathe Azencott, *Introduction au Machine Learning*, 2^e édition, Dunod, 2022.

Mots Clés : Apprentissage statistique, Bases de données.

Intelligence Artificielle et nouvelles approches méthodologiques pour la maîtrise des risques industriels.

Guillaume FAYET

Ineris, Responsable Études et Recherche, Verneuil-en-Halatte

Les activités et produits industriels sont sujets à des risques qu'il convient de maîtriser afin d'éliminer ou au moins limiter leur impact sur l'homme et l'environnement. L'évaluation des risques industriels repose sur des approches expérimentales et de modélisation qui visent entre autres à caractériser les dangers (éco)-toxicologiques et physiques des substances chimiques, évaluer les risques associés aux réactions chimiques dangereuses ou encore estimer les conséquences des phénomènes dangereux associés.

Si l'approche expérimentale représente une pièce fondamentale de l'expertise de l'Ineris, depuis la caractérisation en laboratoire jusqu'aux essais à grande échelle, les progrès scientifiques et techniques ont élargi au cours du temps le panel d'outils disponibles par de nouvelles approches méthodologiques complémentaires permettant d'accéder à des informations plus nombreuses, plus rapidement et parfois plus complètes.

Dans ce contexte, les méthodes de *machine learning* et d'intelligence artificielle ouvrent des potentialités intéressantes que ce soit dans la mise en place de méthodes prédictives et de modélisation ou même dans le traitement et l'exploitation des données issues de campagnes expérimentales.

Cette présentation dressera un panorama des travaux et perspectives de l'apport des nouvelles approches méthodologiques et de l'intelligence artificielle pour l'évaluation et la maîtrise des risques accidentels que ce soit dans un contexte réglementaire ou dans le développement de substances et de procédés intrinsèquement plus sûrs.

Mots Clés : Risques industriels, Machine learning, Nouvelles approches méthodologiques.

Intelligence artificielle et alliages réels : vers une conception computationnelle et responsable.

Stéphane GORSSE

*Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux,
CNRS, Université de Bordeaux, Bordeaux INP*

Les matériaux en général et les alliages en particulier, omniprésents mais souvent sous-estimés, jouent un rôle vital dans de nombreux secteurs allant de la santé et de la mobilité à la construction et à l'énergie. Ils sont nécessaires aux transitions numériques et écologiques qui requièrent plus de fonctionnalités et moins d'incidences environnementales et sociétales. Découvrir ou concevoir sur mesure un alliage innovant, possédant le comportement complexe désiré, consiste à identifier la combinaison de briques élémentaires et les conditions permettant d'ajuster précisément leur organisation à différentes échelles. Il s'agit donc d'explorer un vaste espace de conception, hyper-dimensionnel. Pour cela, le chercheur a d'abord recours à l'empirisme et à son intuition. Puis, depuis quelques décennies, la simulation numérique, à partir de modèles mathématiques traduisant les lois de la physique, est devenue un oracle informatique fécond bien que limité. Aujourd'hui, nourrie par la quantité spectaculaire de données générées, l'intelligence artificielle a le potentiel de repousser certaines limites et, ainsi, d'accroître notre capacité d'exploration. Dans cet exposé, j'illustrerai l'ensemble de ces concepts et utiliserai des exemples pour montrer les progrès récents dans le domaine du design d'une nouvelle génération d'alliages dits à haute entropie.

Mots Clés : Science des matériaux, Métallurgie, Informatique des matériaux, Intelligence artificielle.

Le projet DIADEM : accélérer la découverte de nouveaux matériaux grâce à l'Intelligence Artificielle.

Mario MAGLIONE^a, Frédéric SCHUSTER^b, Alexandre LEGRIS^c

^a ICMCB, CNRS, Université de Bordeaux, Bordeaux INP

^b CEA - Programme Transversal Matériaux & Procédés

^c Directeur Adjoint Scientifique Institut de Chimie du CNRS

Les matériaux sont au cœur des transitions énergétiques et numériques et ils permettent l'émergence de nouvelles technologies dans de nombreux domaines comme la médecine ou le transport. Dans le contexte actuel, le déploiement de nouveaux matériaux doit répondre à trois contraintes :

- le temps limité fixé par l'urgence des enjeux sociétaux rappelés ci-dessus,
- la complexité chimique, structurale et morphologique au sein de multi-matériaux,
- la nécessité absolue de respecter les contraintes environnementales en termes de recours aux matières premières critiques, de durabilité des composants et de recyclabilité.

L'objectif principal du projet DIADEME(*) est d'accélérer la découverte de matériaux en respectant ce triptyque temps/complexité/contraintes environnementales. En réponse à l'appel à projet lancé par le gouvernement dans le cadre du plan France 2030, DIADEME a été sélectionné par un jury international en septembre 2021 parmi la première vague des PEPR(**) exploratoires. Doté d'un montant de 85M€ sur 8 ans, ce projet doit mettre en place les infrastructures nationales nécessaires à la synergie entre science des matériaux et science des données. De manière analogue à ce qui s'est produit dans d'autres domaines scientifiques, il s'agit d'impulser un véritable changement culturel dans la recherche et le développement des matériaux.

Dans la première phase de DIADEME qui est en cours, 17 projets ciblés ont pour tâche principale de mettre en place et de valider l'efficacité de plateformes. Ces plateformes concernent la synthèse et la mise en forme à haut débit, les caractérisations haut débit, la numérisation des matériaux et procédés et l'Intelligence Artificielle. Dans la seconde phase qui commencera en 2024, des appels à projets seront lancés pour la mise en œuvre de ces plateformes au profit de recherches innovantes. Cette ouverture à l'ensemble de la communauté scientifique s'appuiera sur les groupements de recherches déjà existants, sur les sociétés savantes et sur les suggestions de partenaires industriels.

À l'international, DIADEME a déjà suscité l'intérêt de projets similaires tels que Materials Genome Initiative aux USA, MARVEL en Suisse et FAIRMAT en Allemagne. S'agissant d'une modification majeure des méthodes de recherche, la formation initiale et continue sera un élément central de DIADEME. La dissémination vers le grand public de la démarche et des résultats de DIADEME sera également une préoccupation constante des porteurs du projet

(*) Dispositifs Intégrés pour l'Accélération du DÉploiement de Matériaux Émergents

(**) Programme et Équipements Prioritaires de Recherche



Mots Clés : Matériaux Innovants, Synthèse Haut Débit, Matériaux et Procédés Numériques, Intelligence.

L'expérience d'Ondalys dans la formation continue aux outils opérationnels de la Chimiométrie et du Machine Learning.

Sébastien PREYS

Ondalys, Chef de projets Data Science, Montpellier

La Chimiométrie est née dans les années 80 simultanément en Scandinavie (Norvège et Suède) et aux Etats-Unis. Dans la lignée de la Psychométrie et de l'Économétrie auparavant, la Chimiométrie a pour objectif d'analyser et modéliser à l'aide d'outils mathématiques, statistiques et algorithmiques les données issues du domaine de la Chimie au sens large, et de toute l'Industrie des Procédés (Chimie, Pétrochimie, IAA, Pharma, Biotech, Cosmétiques).

L'ensemble des données mesurées au cours du développement des produits et des procédés (R&D), sur des pilotes ou en cours de production sont ainsi collectées, synchronisées, prétraitées et combinées pour tirer toute l'information utile et ainsi mettre au point des outils d'aide à la décision ou au pilotage d'installations, sur la base de la modélisation prédictive. Ces données instrumentales proviennent des mesures réalisées en routine, d'origines et de natures diverses comme des paramètres procédés, des analyseurs en ligne (spectroscopie proche infrarouge, Raman, ...), ou d'analyses de laboratoire (analyses physico-chimiques, chromatographie, spectrométrie de masse, RMN, ...). Toutes ces données ont en commun la particularité de pouvoir être considérées comme des signaux multivariés, au sens statistique du terme (multi-variables).

Ces dernières années ont vu l'intensification de la génération des données (fréquences d'acquisition et résolutions augmentées, objets connectés / IIoT - Industrial Internet-of-Things), ainsi que l'explosion de la puissance et de la vitesse de calcul informatique. Autour de cette dynamique, des concepts comme le Laboratoire du Futur ou l'Industrie 4.0, et même 5.0, ont vu le jour. Plusieurs communautés scientifiques se retrouvent aujourd'hui sous la bannière commune de l'IA et de la Data Science, incluant toute la nouvelle sémantique associée : Big Data, IIoT, Machine Learning, Chimiométrie, Data Analytics, ...

Ondalys se positionne aujourd'hui comme un acteur majeur dans cette révolution de l'IA depuis maintenant 20 ans. Notre activité et notre expertise nous ont amené à traiter de nombreuses données très diverses et développer un grand nombre de projets et applications pour nos clients industriels dans ce domaine, ainsi qu'à former des centaines de Techniciens, Ingénieurs, Managers ou Chercheurs sur ces outils dans le cadre de la formation continue. Cette présentation vise ainsi à partager l'expérience d'Ondalys plus particulièrement dans le domaine de la formation continue aux outils opérationnels de la Chimiométrie et du Machine Learning.

Mots Clés : Chimiométrie, Machine Learning, Data Science, Industrie 4.0, Formation Continue.

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

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.

Intelligence artificielle pour la science et l'industrie.

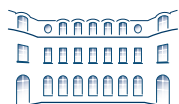
Cédric VILLANI

Université Lyon I et Institut des Hautes Etudes Scientifiques, Bures-sur-Yvette

L'Intelligence artificielle est très attendue dans les domaines de la santé, de la mobilité, de la défense, de l'information, de la gestion des ressources naturelles et économiques, de la finance, des jeux, de la création d'images et de textes...

Mais que peut-elle dans des domaines comme la chimie que l'on imagine plutôt relever de l'industrie "lourde et matérielle" ?

Tentons un point d'étape.



Fondation de la Maison de la Chimie

Maison de la Chimie
28 bis rue Saint-Dominique 75007 Paris