

L'intelligence artificielle met la chimie en émoi

Le centre de recherches d'IBM à Rüschlikon (ZH) crée des outils d'intelligence artificielle qui bouleverseront la recherche et le développement, notamment dans le domaine de la chimie. *Dorothea Wiesmann*

Abrégé L'intelligence artificielle (IA) n'est plus une lubie médiatique mais fait désormais partie de notre quotidien. Pour l'industrie, les outils qui en découlent ouvrent des possibilités inédites d'exploiter des connaissances provenant du monde entier et de les combiner au savoir accumulé à l'interne. Les entreprises peuvent mettre à profit le potentiel de ces outils et armer leurs activités de recherche et développement pour l'avenir dans des projets pilotes. L'IA peut également nous aider à prendre des décisions dans d'autres domaines. Avec le « Debater », elle s'engage par exemple sur le terrain de la formation démocratique de l'opinion : ce programme peut contribuer à une prise de décision fondée, en dégagant d'une masse d'informations les arguments favorables et défavorables à une idée. Transparence et confiance sont les maîtres mots. L'enjeu, désormais : cerner le potentiel, pour l'industrie et la société, d'une IA conçue de façon responsable.

S'il y a une technologie qui agite actuellement les esprits, c'est bien l'intelligence artificielle (IA). Notre société y projette ses rêves de progrès les plus fous comme ses angoisses les plus floues, et Hollywood se charge de faire le reste. Comme souvent, la réalité n'est pas aussi sensationnelle, mais pas inintéressante pour autant.

Depuis 2011, la recherche en IA est en pleine effervescence. Elle vit actuellement une véritable renaissance après une longue traversée du désert. Des progrès significatifs sont en effet réalisés et leur utilité pratique peut déjà se mesurer dans certains domaines. Prochain saut technologique de la numérisation, l'IA nous fournit la base requise pour de nombreuses applications à l'ère des mégadonnées.

Les applications de l'IA ouvrent de nouvelles perspectives pour l'industrie, comme le montre l'instrument «RXN for chemistry», conçu au centre de recherches d'IBM à Rüschlikon (ZH). Dans le programme, les chimistes peuvent combiner une molécule à divers réactifs et prédire les réactions chimiques qui se produiront

en fonction des conditions données. Cet outil permet même de «simuler» des procédés de synthèse complexes en plusieurs étapes. «RXN for chemistry» peut ainsi aider des chimistes à mettre au point et à fabriquer des matériaux, des éléments de construction ou des médicaments sur mesure en recensant toutes les réactions qui se produisent à chaque étape du processus. Lancé en août 2018, cet instrument vole déjà de succès en succès, avec plus de 6500 utilisateurs et 50 000 réactions chimiques produites.

Des parfums pour la génération Y

Outre «RXN for Chemistry», le département IBM Research élabore d'autres systèmes d'IA destinés à la recherche et au développement, par exemple dans la production de parfums et d'arômes. Les parfumeurs du fabricant allemand Symrise ont ainsi créé des fragrances pour la génération Y brésilienne à l'aide du système Philyra.

L'avenir n'est pas sombre pour autant pour les parfumeurs : les nouveaux outils dont ils bénéficieront les aideront à maîtriser la complexité croissante de leurs activités et à tirer le meilleur parti du socle de connaissances existant. Ou, pour reprendre les termes du chimiste américain Derek Lowe : « Les chimistes n'ont pas à craindre d'être remplacés par des machines, mais par des chimistes qui collaborent avec les machines »¹.

La coopération entre l'homme et la machine est au cœur de l'utilisation de l'IA. Cette alliance n'est pas un «plus», mais une nécessité si l'on veut ordonner la quantité incommensurable des données de l'univers numérique et être à la hauteur des enjeux toujours plus complexes

¹ «Making new Drugs With a Dose of Artificial Intelligence», *New York Times*, 2 mai 2019.

d'un monde interconnecté. Le volume de données mémorisées double tous les deux ans, de sorte que l'être humain n'est plus en mesure de conserver une vue d'ensemble. Chaque discipline scientifique produit annuellement des milliers de nouvelles publications, qui s'ajoutent au trésor de connaissances que chaque organisation a accumulé au fil des ans. C'est une véritable caverne d'Ali Baba, le tout étant d'en trouver le sésame.

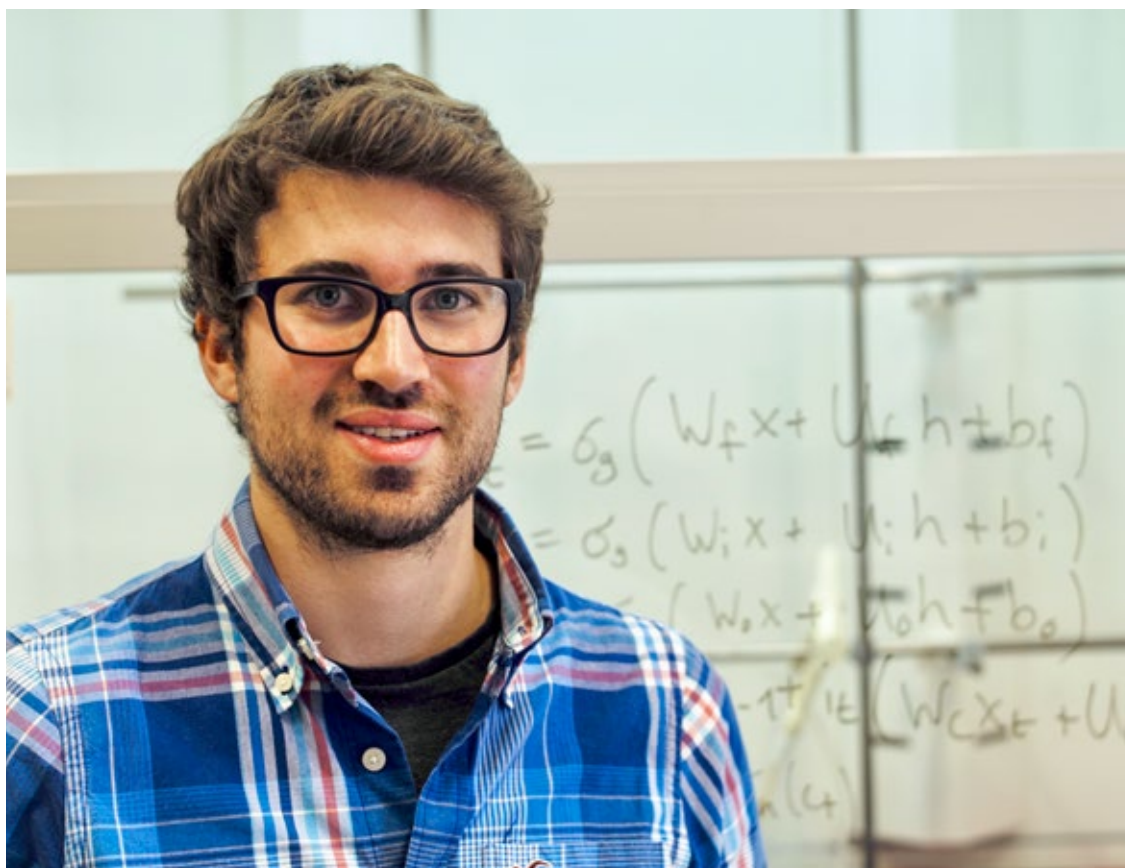
C'est là qu'intervient un autre système d'IA mis au point à Rüschlikon, qui analyse et indexe automatiquement des publications scientifiques afin d'embrasser tout le savoir disponible dans un domaine donné. Appelé «Cognitive discovery», cet outil permet aux chercheurs et développeurs de parvenir plus rapidement à des solutions de grande valeur. Il peut également indiquer les domaines qui n'ont pas encore été prospectés, où il est encore possible de trouver de «l'or». Cet outil est déjà utilisé dans divers projets pilotes : l'industrie métallurgique l'applique à la conception de nouveaux alliages pour la construction aéronautique et le groupe énergétique italien

Eni l'utilise dans la recherche d'hydrocarbures, dans l'espoir de pouvoir exploiter de nouveaux gisements de pétrole.

Un débat avec l'ordinateur

Les systèmes d'IA peuvent aussi nous être utiles lorsqu'il n'y a pas de réponse unique à une question, mais seulement des arguments favorables et défavorables, par exemple concernant le financement de l'exploration spatiale par les pouvoirs publics. Dans un pareil cas, le système IBM «Debater», mis au point à Haïfa (Israël), peut fournir de précieux renseignements. Il est en effet capable d'identifier en un éclair des arguments «pour» et «contre» dans des millions d'articles de journaux, puis de rédiger un bref exposé sur chaque point de vue. Dans un débat, il peut même répondre aux arguments de l'adversaire.

Le «Debater» pourrait ainsi s'avérer utile dans les processus publics de prise de décision. IBM le classe parmi les projets de recherche représentant un défi majeur : il sort des sentiers battus et repousse les limites de l'IA en



L'ingénieur Philippe Schwaller étudie les possibilités de simuler des procédés chimiques avec l'intelligence artificielle chez IBM Research à Rüschlikon (ZH).

matière de reconnaissance vocale, d'analyse et de compréhension de texte, de structure de l'argumentation et de synthèse vocale. Le système a prouvé sa viabilité technique au printemps dernier, lors de la conférence Think 2019 d'IBM à San Francisco, en disputant une joute oratoire contre un champion du monde de débat. Après ce duel, le public a estimé que l'ordinateur avait fourni des arguments plus factuels, mais que la rhétorique de son contradicteur humain avait été plus convaincante. Une appréciation qui souligne une fois de plus la complémentarité de l'homme et de la machine.

Innovation à Lugano

Le « Debater » a été utilisé pour la première fois en Suisse cette année, dans le cadre du « Living Lab Project » de la Ville de Lugano : en août dernier, celle-ci a demandé à ses citoyens, dans le cadre d'un sondage en ligne, s'ils jugeaient souhaitable de continuer à étudier la conception et l'introduction de véhicules autonomes. Le « Debater » a ensuite extrait et résumé les arguments « pour » et « contre » des 2400 avis enregistrés, puis conclu que 68 % des participants au sondage étaient favorables aux véhicules autonomes et 32 % opposés.

Les partisans des véhicules autonomes avançaient surtout comme arguments la réduction des accidents, l'utilité pour les personnes âgées et la protection de l'environnement. Les adversaires affirmaient eux que cette technologie n'était pas encore au point, qu'elle entraînerait une perte de compétences des conducteurs et une suppression d'emplois, ou qu'il serait préférable d'affecter les fonds requis à l'amélioration des transports publics.

Au bout du compte, ce seront bien sûr les élus qui auront le dernier mot, mais l'expérience a montré que ce système d'IA permet de mieux représenter la diversité d'opinions de la société. Dans la vie démocratique, il peut ainsi être utile pour se former un avis fondé sur des preuves.

Tous ces exemples montrent l'importance du potentiel d'innovation en IA pour le pôle industriel et scientifique suisse. Disposer de règles claires pour en garantir une utilisation responsable est à cet égard crucial. Le monde politique doit maintenant poser le cadre législatif adéquat. Quant aux fabricants, il leur incombe de mettre au point des systèmes fiables, régis par une charte éthique garantissant une transparence aussi grande que possible. La recherche d'IBM joue en l'occurrence un rôle de pionnier et définit des principes essentiels.

IBM a annoncé des principes de confiance et de transparence clairs qu'il applique au développement de l'IA. Il publie ainsi les méthodes d'entraînement des systèmes d'IA, les données utilisées à cette fin et les éléments qui constituent les recommandations de l'algorithme. Les règles déontologiques concernent également la gestion des données des clients. Pour IBM, il est évident que les données appartiennent aux clients et qu'elles ne seront pas utilisées à d'autres fins.

Les travaux que nous avons consacrés à ces principes se reflètent déjà dans la législation, comme l'innovant règlement général sur la protection des données de l'Union européenne. Si nous poursuivons sur cette voie et agissons de manière responsable, l'IA pourra être d'une grande utilité pour notre société et notre économie.



Dorothea Wiesmann

Collaboratrice personnelle du directeur mondial de la recherche d'IBM depuis septembre 2019, ancienne responsable du département Recherche en intelligence artificielle et industrie d'IBM Research, Zurich