



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.