

IBM étend ses capacités de découverte de matériaux basées sur l'IA et signe de nouvelles collaborations industrielles

IBM RoboRXN, un laboratoire automatisé par l'IA basé sur le Cloud et conçu pour favoriser une nouvelle ère de découverte moléculaire accélérée, prend désormais en charge les ensembles de données propriétaires et la chimie verte

Zurich, Suisse, le 1^{er} décembre 2021 : IBM (NYSE:[IBM](#)) a annoncé aujourd'hui de nouvelles améliorations apportées à RoboRXN, un laboratoire automatisé par l'IA basé sur le Cloud et conçu pour permettre la découverte et la création à distance de nouvelles molécules et de nouveaux matériaux. Lancé en 2018, RXN for Chemistry (RXN pour la chimie) -- l'IA derrière RoboRXN -- a été utilisé par plus de 29 000 utilisateurs et a accumulé plus de cinq millions de prédictions de réactions dans le but de rationaliser le processus scientifique autour de la découverte et de la création de nouveaux matériaux.

Si RoboRXN exploite des capacités de pointe en matière de Cloud et d'IA pour améliorer la découverte de matériaux, il est essentiel que ce processus soit sécurisé pour les organisations qui travaillent avec des données propriétaires. En outre, il est de plus en plus nécessaire d'améliorer la durabilité tout au long des processus de fabrication, y compris les réactions chimiques qui transforment les matières premières en produits finis.

Pour relever ces défis, IBM proposera désormais deux nouvelles fonctionnalités dans RoboRXN :

- **Sécurité et personnalisation** : de nouvelles fonctionnalités Cloud permettent aux utilisateurs d'entraîner RXN directement avec des ensembles de données sensibles pour une expérimentation plus sécurisée et la personnalisation des modèles de prédiction à l'aide de connaissances propriétaires.
- **Des processus chimiques plus écologiques** : un nouveau modèle d'IA aide désormais les chimistes à prédire et à identifier rapidement des enzymes plus respectueuses de l'environnement. Les enzymes sont des molécules biologiques très complexes nécessaires à la conversion de matériaux en produits tels que le papier, les cosmétiques, les produits pharmaceutiques et les arômes.

IBM annonce également de nouvelles collaborations avec Atinary, Arctoris, Chemspeed Technologies AG, Syngenta et Thieme Chemistry afin de continuer d'accélérer la synthèse et les tests de nouveaux matériaux dans de nombreuses industries à l'aide de RoboRXN.

Accélérer la découverte de matériaux

Il faut parfois près de 10 ans et plus de 10 à 100 millions de dollars pour identifier et produire un nouveau matériau. Ceci s'explique par le fait que la chimie de synthèse repose encore sur des méthodes d'essai et d'erreur, et que peu de progrès ont été réalisés pour moderniser l'art de la fabrication des matériaux.

« Pour créer un nouveau matériau aujourd'hui, les chercheurs doivent voyager à travers un espace chimique apparemment sans fin, rempli de davantage de composés potentiels qu'il n'y a d'atomes dans l'univers », a

déclaré le **Dr. Alessandro Curioni, IBM Fellow and Director of IBM Research Europe** . « Pour aider à résoudre bon nombre des défis qui nécessitent de nouveaux matériaux - de la faim au changement climatique en passant par les maladies infectieuses - les chercheurs doivent être en mesure d'imaginer, de synthétiser et de tester efficacement les matériaux potentiels. L'application de l'IA à cette tâche considérable grâce à des technologies telles que RoboRXN a le potentiel d'aider presque toutes les industries à accélérer l'efficacité, la durabilité et l'impact des nouveaux matériaux qu'elles créent. »

IBM RoboRXN est conçu pour servir de navigateur aux chimistes afin qu'ils découvrent et fabriquent des matériaux de manière plus rentable que par les procédés traditionnels, en automatisant une grande partie du travail initial de synthèse des matériaux. Les utilisateurs peuvent également synthétiser des matériaux à distance via le Cloud.

Découvrir des procédés chimiques plus écologiques

RoboRXN propose désormais des solutions de chimie durable qui utilisent l'IA pour identifier et classer les processus enzymatiques efficaces et durables, ce qui permet de réaliser des synthèses chimiques plus écologiques. Par exemple, les chimistes peuvent utiliser cette nouvelle architecture d'IA pour tirer parti des énormes volumes d'enzymes potentiellement connues afin de remplacer les catalyseurs chimiques traditionnels et les solvants toxiques par des composés naturels dérivés de plantes et de légumes.

L'une des principales limites à l'application de solutions de chimie durable est que les connaissances spécifiques du domaine requises pour adapter les enzymes existantes à de nouvelles transformations chimiques ne sont pas structurées. Il est donc difficile et chronophage de découvrir de nouvelles enzymes potentielles via les méthodes d'expérimentation traditionnelles.

La découverte d'enzymes pour la synthèse organique pourrait permettre d'élaborer des produits plus respectueux de l'environnement par des moyens plus simples, plus économiques et plus durables. Les cas d'usage industriels vont de l'industrie agro-alimentaire à l'industrie pharmaceutique en passant par les cosmétiques, etc. Dans la production de papier, par exemple, la pâte à papier peut être traitée avec de la xylanase, une enzyme naturelle, au lieu de l'eau de Javel, qui est coûteuse et polluante.

Des applications industrielles en pleine expansion

Chacun des collaborateurs d'IBM, expert d'une industrie, teste RoboRXN de manière unique et personnalisée, dans le but de révolutionner la pratique de la chimie organique et d'accélérer la découverte de matériaux. IBM consulte et collabore activement avec chaque entreprise, en les aidant à intégrer diverses caractéristiques techniques de RoboRXN dans leurs workflows :

- [Atinary Technologies et IBM ont lancé une collaboration](#) visant à intégrer leurs deux plateformes Cloud, Atinary Self-driving Platform (Atinary™ SDLabs) et IBM RoboRXN, afin d'accélérer et de révolutionner l'optimisation des réactions chimiques.

- [Arctoris et IBM ont lancé un partenariat de recherche](#) visant à combiner RXN for Chemistry avec Ulysses, la plateforme automatisée de biologie et de biochimie d'Arctoris, clôturant ainsi le cycle Conception-Fabrication-Test-Analyse dans la découverte de médicaments.
- **Chemsped Technologies AG** collabore avec IBM dans le but d'offrir la technologie IBM RoboRXN comme solution à ses clients.
- **Syngenta** a mis en œuvre la technologie RXN dans son processus de découverte de matériaux.
- [Thieme Chemistry et IBM](#) ont uni leurs forces pour améliorer la planification des synthèses en incorporant dans RXN for Chemistry des ensembles de données de synthèse provenant des sources de publications numériques de Thieme sur la chimie organique - Science of Synthesis et Synfacts - sélectionnées par des experts. Le 1er décembre 2021, IBM Research et Thieme Chemistry organisent un [séminaire en ligne](#) gratuit, au cours duquel les résultats de leur collaboration seront présentés.

*« L'avenir des matériaux et de la chimie est dans le Cloud, avec le développement et l'adoption de technologies numériques pour accélérer la découverte », déclare le **Dr. Teodoro Laino, Distinguished Scientist at IBM Research Europe -Zurich.** « Le Cloud est l'infrastructure idéale pour encourager et stimuler la coopération entre les différents fournisseurs de technologies et encourager la transition vers des solutions numériques dans les opérations de R&D quotidiennes. RoboRXN joue un rôle stratégique en tant que précurseur de ce nouveau processus d'intégration et de développement dans l'industrie et la recherche dans le domaine de la chimie. »*

[RXN for Chemistry](#), le moteur central de RoboRXN, est piloté par une méthode de traduction neuronale par machine learning de pointe qui prédit le résultat le plus probable d'une réaction chimique. Pour cela, il traduit d'un langage (réactifs) à un autre (produits) en utilisant des séquences de caractères appelées [SMILES](#) (Simplified Molecular Input Line Entry System) pour décrire les entités chimiques.

Les voies de synthèse optimisées sont ensuite utilisées comme données d'entrée pour [RoboRXN, une plateforme automatisée de synthèse de molécules](#). Le système d'IA est également doté d'une [architecture rétrosynthétique](#) dans laquelle, au lieu de prédire le produit d'une éventuelle réaction chimique, il travaille en sens inverse pour déterminer d'abord les produits chimiques nécessaires à la création d'une molécule cible donnée.

Cette plateforme d'IA basée sur le Cloud a été initialement conçue et lancée en 2018 et mise à disposition gratuitement sur le Cloud d'IBM. Depuis son lancement, RoboRXN a surpassé tous les modèles basés sur les données, atteignant une précision de plus de 90 % sur les prédictions de produits de réactions chimiques, et est actuellement utilisé par plus de 29 000 utilisateurs et a accumulé plus de 5 millions de prédictions de réactions. Aujourd'hui, il est testé dans les workflows de certaines des plus grandes entreprises pharmaceutiques, biotechnologiques et agricoles, les aidant à accélérer les prédictions de réactions chimiques, les voies de rétrosynthèse, les procédures expérimentales ainsi qu'à automatiser la compilation et l'exécution des synthèses chimiques.

À propos d'IBM Research

Depuis plus de sept décennies, IBM Research a défini l'avenir des technologies de l'information avec plus de 3 000 chercheurs répartis sur 16 sites sur cinq continents. Les scientifiques d'IBM Research ont produit six lauréats du prix Nobel, dix médailles nationales américaines de technologie, cinq médailles nationales américaines de science, six prix Turing, 19 personnes intronisées à l'Académie nationale des sciences et 20 personnes intronisées au National Inventors Hall of Fame des États-Unis. Pour en savoir plus :

www.research.ibm.com/.

Contacts presse :

Weber Shandwick pour IBM

IBM

Gaëlle Dussutour

Tél. : + 33 (0) 6 74 98 26 92

dusga@fr.ibm.com

Jennifer Tshidibi / Eric Chauvelot

Tél. : + 33 (0)6 13 94 26 58 / + 33 (0)6 21 64

28 68

ibmfrance@webershandwick.com
