

# Exploration robotique: à la découverte de nouveaux matériaux grâce à l'IA

Découvrez comment l'intelligence artificielle révolutionne la conception de nouveaux matériaux

Découvrez comment l'intelligence artificielle révolutionne la conception de nouveaux matériaux

Pour concevoir de nouveaux matériaux, les chercheurs mettent l'intelligence artificielle à

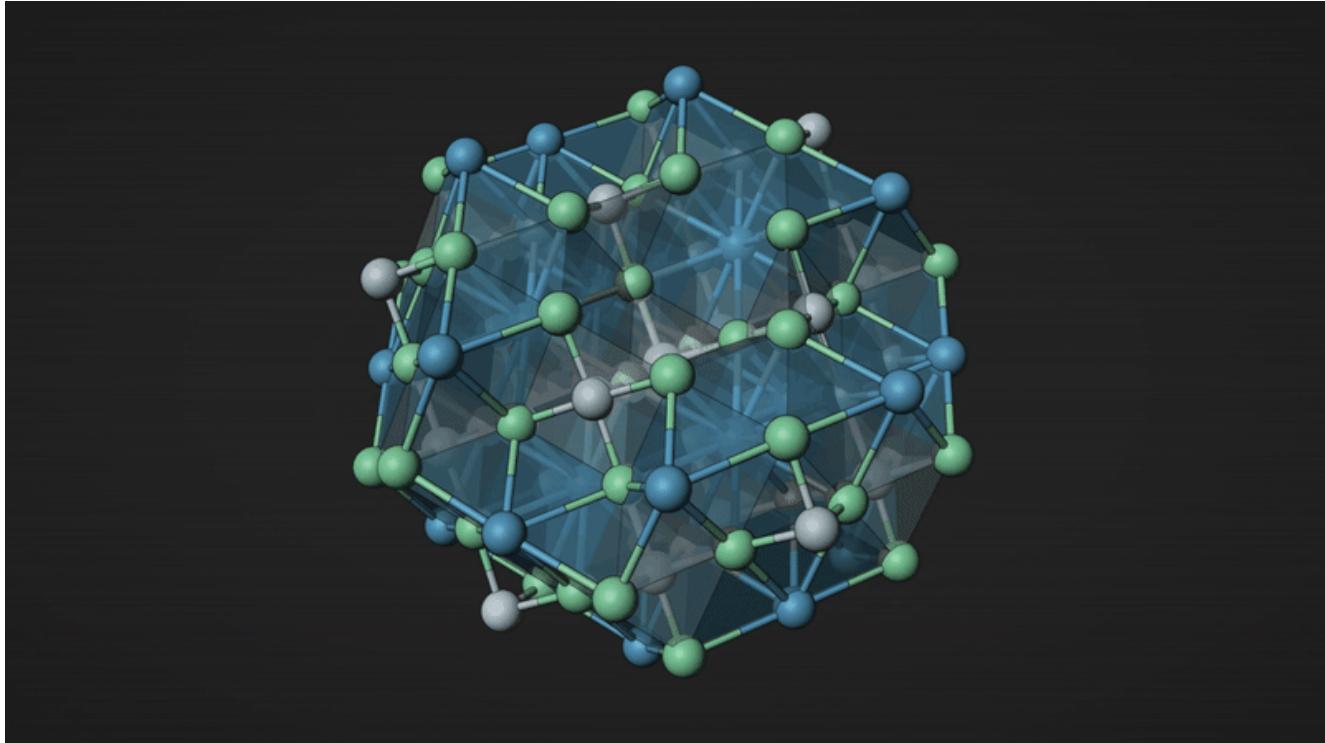
# contribution

Pour concevoir de nouveaux matériaux, les chercheurs ne partent pas de rien, ils vont se baser sur les structures de matériaux déjà connus et la modifier légèrement, souvent en substituant un atome par un atome similaire. Une fois une structure déterminée, il faut vérifier sa stabilité. Pour ce faire, les chercheurs utilisent des méthodes de simulations ne pouvant tourner en un temps raisonnable que sur des [supercalculateurs](#) (serveurs, aux capacités énormes, utilisés par les chercheurs pour faire tourner des algorithmes demandeurs en ressources).

À ces calculs théoriques s'ajoute la recherche d'une synthèse permettant d'obtenir le matériau souhaité. Lors de cette phase, chaque échantillon obtenu par un protocole de synthèse testé se doit d'être caractérisé (il faut déterminer la nature et la position des atomes qui le constitue). C'est une fois la caractérisation faite que le chercheur peut analyser les résultats et choisir quelles sont les modifications à apporter à la synthèse. En suivant ces étapes, cela peut prendre plusieurs mois à un physicien pour concevoir un nouveau matériau et déterminer une procédure de synthèse.

## Plus de 2,2 millions de nouvelles structures cristallines

Or GNoME est parvenu rapidement à déterminer plus de 2,2 millions de nouvelles structures cristallines (structures internes des matériaux) présentant une certaine stabilité.



*La structure cristalline du Ba<sub>6</sub>Nb<sub>7</sub>O<sub>21</sub>, l'un des matériaux prédis par GNoME. Le barium est en bleu, le niobium en gris et l'oxygène en bleu. Crédits : Materials Project/Berkeley Lab*

Parmi la mine de matériaux suggérés par l'intelligence artificielle, plus de 380.000 vont enrichir la base de données [The Materials Project](#), fondée par des chercheurs de l'université américaine de Berkeley et servant de grande bibliothèque des matériaux. Cette grande base de données permet aux chercheurs de cataloguer les matériaux ainsi que leur propriété (s'ils sont conducteurs ou isolants, leurs propriétés magnétiques, ou encore s'ils ont déjà été observés expérimentalement) mais également de les calculer automatiquement par simulation quand cela est nécessaire.

Lire aussi [GraphCast, l'intelligence artificielle de Google qui révolutionne les prévisions météo](#)

# Un réseau de neurones

L'approche par intelligence artificielle GNoME se base sur une catégorie de réseaux de neurones spécialisés dans le traitement d'informations pouvant être représentées par un graphe. Ce dernier est un objet mathématique constitué de nœuds reliés entre eux par des arêtes, ce qui est le cas d'une structure cristalline.

L'IA a été entraînée à partir des données de The Materials Project en 2018, soit l'équivalent de 69.000 matériaux différents. Le réseau de neurones est ainsi capable de proposer des structures cristallines en les dérivant de la base donnée. Une des caractéristiques principales de leur technologie est qu'elle est capable d'apprendre de ses erreurs (et de ses réussites). Chaque cristal proposé passe par un ensemble de simulation (similaire à celle de The Materials Project), les informations récupérées de cette simulation sont ensuite fournies en données d'entrée et d'apprentissage pour l'IA. C'est grâce à ce procédé d'apprentissage actif que GNoME réussit à s'améliorer au-delà même des données fournies initialement.

Lire aussi [\*“La vague déclenchée par l'exploit de l'algorithme de DeepMind AlphaFold n'est pas retombée”\*](#)

# Un laboratoire automatique pour accélérer le test de ces matériaux

Le 29 novembre 2023 également, ces chercheurs de Berkeley ont publié, dans [\*Nature\*](#), les premiers résultats de leur laboratoire automatisé fonctionnant en partie grâce à l'intelligence artificielle, le [\*A-Lab\*](#). Ce laboratoire est capable de déterminer des procédures de synthèse des matériaux en se basant sur la littérature scientifique et sur les

expériences qu'il a effectuées.

☒

*Crédits : Berkeley Lab/US Department of Energy*

Le labo est donc constitué de plusieurs parties : des bras robotiques, des fours contrôlables par ordinateur, pouvant chauffer de 600°C à 1100°C, ou encore d'un analyseur à rayons X, appareil capable de déterminer la structure interne d'un matériau à l'aide des rayons X. Tous ces appareils de pointe sont dirigés par une intelligence artificielle. Cette dernière a été entraînée sur une base de données regroupant des protocoles de synthèse récupérés dans près de 25.000 publications.

Pour récupérer les informations importantes de ces articles, les chercheurs ont utilisé une autre intelligence artificielle spécialisée dans le langage naturel, c'est-à-dire capable d'interpréter des textes écrits par l'humain sans avoir besoin d'intervention humaine préalable sur le texte. L'intelligence artificielle est ensuite capable de détecter les similarités entre le matériau cible et ceux de la littérature pour déterminer les poudres à mélanger, leur proportion et les températures des fours nécessaires.

## 100 échantillons par jour

La fabrication est opérée automatiquement par les robots. Une fois celle-ci terminée, les bras robotiques pulvérisent le solide obtenu et l'amènent à l'analyseur à rayons X. Ce dernier utilise le phénomène de diffraction (déviation des rayons lumineux par la présence d'objets de petite taille, ici les atomes constituant le cristal). À partir des résultats de la diffraction, il est possible de déterminer la nature et la position des atomes dans le cristal analysé. Ces résultats sont ensuite, à l'instar des simulations pour GNoME, utilisés pour réentraîner le modèle et réajuster les fabrications

proposées.

Grâce à cette automatisation, le laboratoire a réussi à déterminer en 17 jours la synthèse de 41 matériaux (sur les 58 analysés), à un rythme de 100 échantillons par jour. Ce rythme d'environ deux matériaux par jour permet une accélération dans la recherche de matériaux innovants – rappelons qu'un humain peut mettre plusieurs mois pour un seul matériau.