DAILY SCIENCE
DÉCOUVREZ LA SCIENCE, LA RECHERCHE ET L'INNOVATION "MADE IN BELGIUM"

L'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE FAIT ENTRER LA CHIMIE DANS UNE NOUVELLE DIMENSION

Publié le 18 novembre 2026



par Christian Du Brulle

Série : Face à l'IA, les chercheurs soufflent le chaud et le froid (1/3)

Récemment, en Belgique, deux rencontres concernant l'irruption de l'IA dans la recherche scientifique ont apporté divers regards sur cette nouvelle réalité. Parfois positifs et enjoués, parfois moins…

« Pour prédire le comportement de molécules, accélérer la découverte de médicaments ou encore concevoir de nouveaux matériaux, l'intelligence artificielle ouvre des perspectives inédites », estimait Alexandre Tkatchenko, lors de la première conférence belge consacrée au calcul haute performance (HPC, en anglais). Aussi appelé calcul intensif, le HPC est une technique qui regroupe les activités de calculs réalisées sur un supercalculateur, en particulier à des fins de simulation numérique et de préapprentissage d'intelligence artificielle.

Titulaire de la chaire de physique chimique théorique à l'Université du Luxembourg, le Pr Tkatchenko est spécialisé dans les interactions entre molécules. Il travaille depuis une quinzaine d'années à rapprocher la physique quantique de la chimie grâce à l'apprentissage automatique (*machine learning*). Comment? En observant, grâce aux supercalculateurs, le comportement de millions d'atomes. Ce qui permet de gagner du temps, de comprendre leurs interactions et de prédire la formation de nouvelles molécules. Le tout en quelques minutes.

Des simulations un million de fois plus rapides

« Pour comprendre la matière à l'échelle atomique, il faut disposer de ressources informatiques considérables. Les simulations fondées sur la mécanique quantique permettent de prédire avec une grande précision le comportement des molécules et des matériaux. Mais elles nécessitent une puissance de calcul gigantesque », continue Alexandre Tkatchenko. « Dans les centres de calcul haute performance, ces simulations représentent entre 30 et 60 % des ressources informatiques disponibles. Au Luxembourg, elles mobilisent environ 60 % de la puissance de calcul. »

L'enjeu est de rendre ces simulations plus rapides sans sacrifier leur précision. Pour y parvenir, son équipe développe des modèles d'apprentissage automatique capables d'imiter les calculs quantiques. Le principe est relativement simple. On entraîne des réseaux neuronaux à partir de millions de données issues de simulations quantiques. Une fois entraînés, ces modèles peuvent prédire le comportement des atomes beaucoup plus rapidement que les méthodes traditionnelles.

« Pour des systèmes de taille réaliste, ces modèles peuvent être jusqu'à dix millions de fois plus rapides que les calculs quantiques directs », souligne le chercheur. « Cette accélération change radicalement les possibilités de la recherche. Elle permet notamment de simuler des protéines, d'étudier des matériaux pour les batteries ou encore de comprendre les réactions chimiques dans des conditions proches de la réalité. »

L'exemple du ritonavir

L'un des exemples les plus parlants avancé par Alexandre Tkatchenko concerne l'industrie pharmaceutique. Il évoque le cas du ritonavir, un médicament antiviral utilisé contre le VIH et commercialisé depuis 1996.

« Deux ans après son approbation de mise sur le marché, une nouvelle forme cristalline, plus stable mais moins soluble de cette molécule, est apparue. Ce qui semblait a priori intéressant s'est transformé en un gros problème pour la firme pharmaceutique. Le médicament se dissolvait moins efficacement dans l'organisme que la formule initiale. Et les capsules ont dû être retirées du marché.»

« Ce phénomène, appelé polymorphisme cristallin, constitue un véritable casse-tête pour les laboratoires. Une même molécule peut former plusieurs structures cristallines, dont certaines sont plus stables que d'autres. Or, une modification de cette organisation peut affecter directement l'efficacité d'un médicament », indique Alexandre Tkatchenko. « Si l'on pouvait prédire toutes les structures cristallines possibles, on pourrait savoir si celle que l'on produit est réellement la plus stable ou la plus intéressante. »

Son équipe a développé en 2012 une méthode baptisée DFT+MBD, permettant de mieux calculer les interactions entre molécules. Adoptée en 2015 par une jeune entreprise spécialisée dans les simulations moléculaires, cette technologie a ensuite été utilisée par de grands groupes pharmaceutiques. Les résultats obtenus lors de deux tests internationaux, en 2016 et 2022, ont convaincu l'industrie. Une illustration concrète du rapprochement possible entre recherche fondamentale et applications commerciales.

« On entend souvent dire qu'il faut dix à quinze ans pour transférer une découverte académique vers l'industrie. Dans le domaine des simulations, cela peut prendre seulement deux à trois ans », observe-t-il.

Vers une IA capable de comprendre la matière

Au cœur de ses recherches, se trouve donc un objectif ambitieux qui peut créer des modèles capables de prédire le comportement de la matière à partir des lois fondamentales de la physique quantique.

Son équipe a notamment développé SOLAR, un modèle d'intelligence artificielle capable de simuler des systèmes moléculaires complexes. Il peut traiter des millions d'atomes sur un seul processeur

graphique (GPU).

Les applications sont prometteuses. Dans une étude consacrée à une petite chaîne de molécules, les simulations ont permis de mettre en évidence des changements de structure qui échappaient aux méthodes classiques. Elles ont notamment révélé une alternance dynamique entre différentes configurations, également observée expérimentalement.

Plus récemment, les chercheurs ont participé à un défi international visant à identifier de nouvelles molécules capables de se fixer sur une protéine impliquée dans la résistance de certaines cellules cancéreuses aux traitements. En seulement trois mois, l'équipe a identifié une molécule candidate dont la capacité à se lier à la protéine a été confirmée expérimentalement.

« Ce n'est pas encore un médicament », précise prudemment Alexandre Tkatchenko. « Mais cette découverte démontre la capacité de ces outils à accélérer considérablement les premières étapes de la recherche thérapeutique. »

La promesse est immense : mieux comprendre la matière, accélérer la découverte de médicaments et inventer les matériaux de demain. Et peut-être faire de la simulation un nouvel instrument incontournable de la science.