

Zeitschrift: Horizons : le magazine suisse de la recherche scientifique
Herausgeber: Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique
Band: 29 (2017)
Heft: 113

Rubrik: Point fort IA dans la recherche : l'envol de la science in silico

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 11.02.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>



Par écran interposé, il nous observe, entre intérêt et perplexité. Dans sa série The Man Machine, l'artiste Vincent Fournier donne une étrange humanité à ces robots qui tentent – sans trop de succès – de s'intégrer dans notre société.

Photo: Reem B #7 [Pall], Barcelone, Spain, 2010. Vincent Fournier

La recherche scientifique veut elle aussi profiter de l'intelligence artificielle. Mais quand faut-il faire confiance à des résultats générés par des algorithmes?

L'envol de
la science in silico

Un robot au labo

Des machines automatisent des expériences scientifiques répétitives. D'autres vont plus loin: elles élaborent elles-mêmes des hypothèses inédites et les testent par la suite.

Par *Edwin Cartlidge*

Effectuer une expérience scientifique sans quitter son bureau, remplir la moindre éprouvette ou jeter un œil dans un microscope. C'est la vision d'Emerald Cloud Laboratory: la société offre aux chercheurs de mener leurs travaux via Internet. Biologistes et chimistes peuvent formuler les protocoles et les superviser, modifier les paramètres des réactions et analyser les résultats. De quoi étendre le concept de cloud computing de la simple gestion des données au contrôle de processus à distance. L'idée est de libérer les chercheurs des travaux astreignants afin de leur laisser le temps de concevoir de meilleures expériences.

Ce service est fourni depuis un entrepôt de la région de San Francisco. Alignés en rang sur des bancs d'essai, des robots manipulateurs de liquides, des incubateurs automatisés et des centrifugeuses traitent les échantillons selon les instructions détaillées soumises par les utilisateurs via une interface en ligne. Les automates travaillent en continu de manière plus ou moins autonome, et les résultats arrivent sur l'ordinateur du chercheur en général dans les 24 heures suivant la requête.

Il n'existe que peu d'entreprises à offrir ce type de prestations. La première, Transcriptic, a été fondée en 2012 et a ses locaux à une vingtaine de kilomètres d'Emerald. La communauté scientifique compte déjà des enthousiastes. Justin Siegel, expert en biologie synthétique à l'Université de Californie à Davis, dit que ses étudiants chercheurs sont ainsi en mesure de tester davantage d'hypothèses et en formuler de plus audacieuses que s'ils effectuaient eux-mêmes les expériences. Cela permet aussi à des étudiants des degrés inférieurs de participer. «Ils peuvent se concentrer sur l'élaboration des expériences sans s'inquiéter de leur habileté à les exécuter», explique-t-il.

Emerald pourrait être victime de son propre succès. Son service cloud a démar-

ré en octobre 2016, et plusieurs centaines de laboratoires sont sur une liste d'attente. Son co-fondateur, Brian Frezza se dit confiant: il estime que société sera en mesure d'effectuer d'ici un an environ les cent expériences les plus courantes dans les sciences de la vie. Elle en offre actuellement une quarantaine. «Nous voulons être rentables à ce moment-là», dit-il.

La recherche connaît déjà bien les robots. Depuis des années, les laboratoires pharmaceutiques les utilisent pour des tâches longues et répétitives au début du développement d'un médicament. La biotechnologie y recourt pour manipuler l'ADN - un domaine en forte expansion où des fabricants d'appareils tels que Tecan, basé près de Zurich, satisfont la demande. «Les machines peuvent maintenant exécuter presque toutes les tâches qu'un humain effectue en laboratoire», explique Ross King, biologiste et informaticien à l'Université de Manchester en Grande-Bretagne.

L'avantage: la reproductibilité

Le séquençage de l'ADN constitue probablement l'archétype de l'automatisation dans les sciences. Par le passé, seuls quelques laboratoires assuraient le travail fastidieux nécessaire pour déterminer l'ordre des paires de bases nucléiques, aujourd'hui effectué par des automates à même de lire le matériel génétique des millions de fois. Ils ont été centralisés dans des plateformes technologiques, et les laboratoires assurent rarement eux-mêmes cette procédure, note Justin Siegel.

Ce que réalise Emerald est «fondamentalement différent», argue Brian Frezza. Au lieu de répéter «peut-être un million de fois la même expérience comme dans une usine automobile, nous faisons un million d'expériences différentes à la fois». Mais l'entreprise n'a pas l'ambition de concurrencer les prix des sociétés de recherche contractuelle qui combinent travail hu-

main et automatisé. Car ses robots ont de la peine avec les séries d'étapes successives (au contraire de procédures analogues menées simultanément). Au final, ils travaillent en général moins vite que des laborantins et reviennent plus cher.

Le grand avantage offert par les robots est la reproductibilité, avance Brian Frezza, car ils «manipulent toujours leurs pipettes exactement de la même manière». Il a fallu pour cela développer un jeu d'instructions qui permette aux scientifiques de définir exactement et sans la moindre ambiguïté les différentes étapes à accomplir par le robot pour une expérience donnée. Brian Frezza dit avoir réussi, après des années de travail, à développer un ensemble robuste de commandes, mais l'interface doit devenir plus conviviale. «L'idée d'écrire en code tend à rebuter les gens.»

«Les étudiants peuvent se concentrer sur l'élaboration des expériences sans s'inquiéter de l'exécution.»

Justin Siegel

Richard Whitby, chercheur à l'Université de Southampton en Grande-Bretagne, souligne lui aussi l'importance de la reproductibilité. La flexibilité des humains représente certes un avantage de taille pour réaliser des réactions complexes dans son domaine, la chimie organique. Pourtant, les publications scientifiques rendent souvent mal compte de cette complexité: ils omettent par exemple de préciser à quelle vitesse un réactif a été ajouté. Sans connaître tous les paramètres d'une réaction, il est difficile de quantifier l'effet de la modification d'une variable précise dans le but d'améliorer le processus chimique, note le chercheur.

Les laborantins reviennent moins chers que les machines.

Le chimiste dirige le projet Dial-a-Molécule, qui veut construire une machine capable de synthétiser à la demande n'importe quel composé organique - à l'instar de ce qui se passe aujourd'hui en génétique, où des fragments spécifiques d'ADN peuvent être simplement commandés par la poste. Richard Whitby ne se fait pas d'illusions sur la difficulté du projet: l'appareil devra réaliser des dizaines de milliers de réactions différentes, contre seulement quatre dans le cas des synthétiseurs d'ADN. Il se donne «de trente à quarante ans» pour y parvenir.

Les hypothèses automatiques

La vision de Ross King à Manchester est encore plus ambitieuse: il veut «automatiser le cycle complet de la recherche scientifique». Son équipe utilise, comme les entreprises du cloud, des robots commerciaux mais va plus loin en les connectant à des systèmes d'intelligence artificielle. Formé dans un domaine spécifique par la logique et la théorie des probabilités, un robot devra de lui-même élaborer des hypothèses afin d'expliquer une série d'observations. Dans un deuxième temps, le système développe des expériences afin de tester ses hypothèses, qu'il mène tout seul, avant de générer de nouvelles pistes. Le cycle pourra se répéter plusieurs fois dans le but d'apprendre quelque chose de nouveau sur le monde.

Ces idées, Ross King les a développées à l'Université d'Aberystwyth, dans le pays de Galles. Il y a construit le robot Adam qui a identifié en 2008 de nouveaux gènes responsables de l'encodage de certaines enzymes de la levure. Le chercheur s'est ensuite attelé à Eve, un robot d'un million de dollars. Ce dernier a découvert le mécanisme antipaludéen du triclosan, un produit antibactérien et antifongique courant, et ainsi ouvert la voie vers son éventuelle homologation.

La science des matériaux recourt elle aussi de plus en plus aux robots. En 2016, les ingénieurs du laboratoire de recherche de l'armée de l'air américaine dans l'Ohio ont présenté les résultats d'essais effectués par un robot doté d'intelligence artificielle sur des nanotubes de carbone, des molécules

cylindriques résistantes, légères et bonnes conductrices de chaleur et d'électricité. La machine a réalisé de manière autonome plus de 600 expériences où elle a modifié les paramètres pour essayer d'accélérer la croissance des nanotubes. Ses résultats ont confirmé des prévisions théoriques sur le taux de croissance maximal.

D'autres scientifiques veulent même automatiser les découvertes en physique, bien qu'ils n'utilisent pas des robots en tant que tels. Hod Lipson de l'Université Cornell a développé un algorithme qui génère au hasard des équations avant de sélectionner, selon un processus évolutionniste, celles qui correspondent le mieux à des données expérimentales. En 2009, son équipe a annoncé avoir formulé de cette manière un modèle du pendule double (un système mécanique relativement simple) et être parvenue à ce qu'elle décrit comme des lois de conservation pertinentes en physique. Deux ans plus tard, elle a utilisé des données sur le métabolisme de la levure pour dériver des équations décrivant l'énergie libérée par la dégradation du sucre.

«Les machines s'améliorent sans cesse alors que les hommes ne changent pas.»

Ross King

Mais tout le monde n'est pas convaincu. Dans une lettre envoyée en 2009 à la revue *Science*, les physiciens américains Philip Anderson et Elihu Abrahams ont accusé les équipes de Ross King et de Hop Lipson de «se tromper gravement sur la nature de l'entreprise scientifique». Ils relèvent que les machines contribuent à ce que le philosophe Tomas Kuhn appelle la science normale, mais ne découvriront jamais de nouvelles lois physiques capables de la transformer. Ils soutiennent que «des lois physiques pertinentes et les variables sont connues d'avance» dans les recherches de Hop Lipson sur les pendules.

Ross King reconnaît que les machines ont leurs limites et relève qu'un robot qui mène à bien une expérience ne sait pas

Lexique de l'intelligence artificielle (IA)

• Apprentissage automatique

(**machine learning**): ce domaine de l'IA développe des algorithmes capables d'apprendre par eux-mêmes à résoudre un problème donné (reconnaissance, classification, prédiction, traduction, etc.).

• Apprentissage supervisé:

des données d'entraînement (par exemple des paires liant les propriétés d'un objet à sa catégorie) nourrissent l'algorithme qui peut ainsi créer un modèle lui permettant de classer de nouveaux objets. L'**apprentissage non-supervisé** peut révéler des structures cachées dans des données, sans passer par des exemples.

• Apprentissage par renforcement:

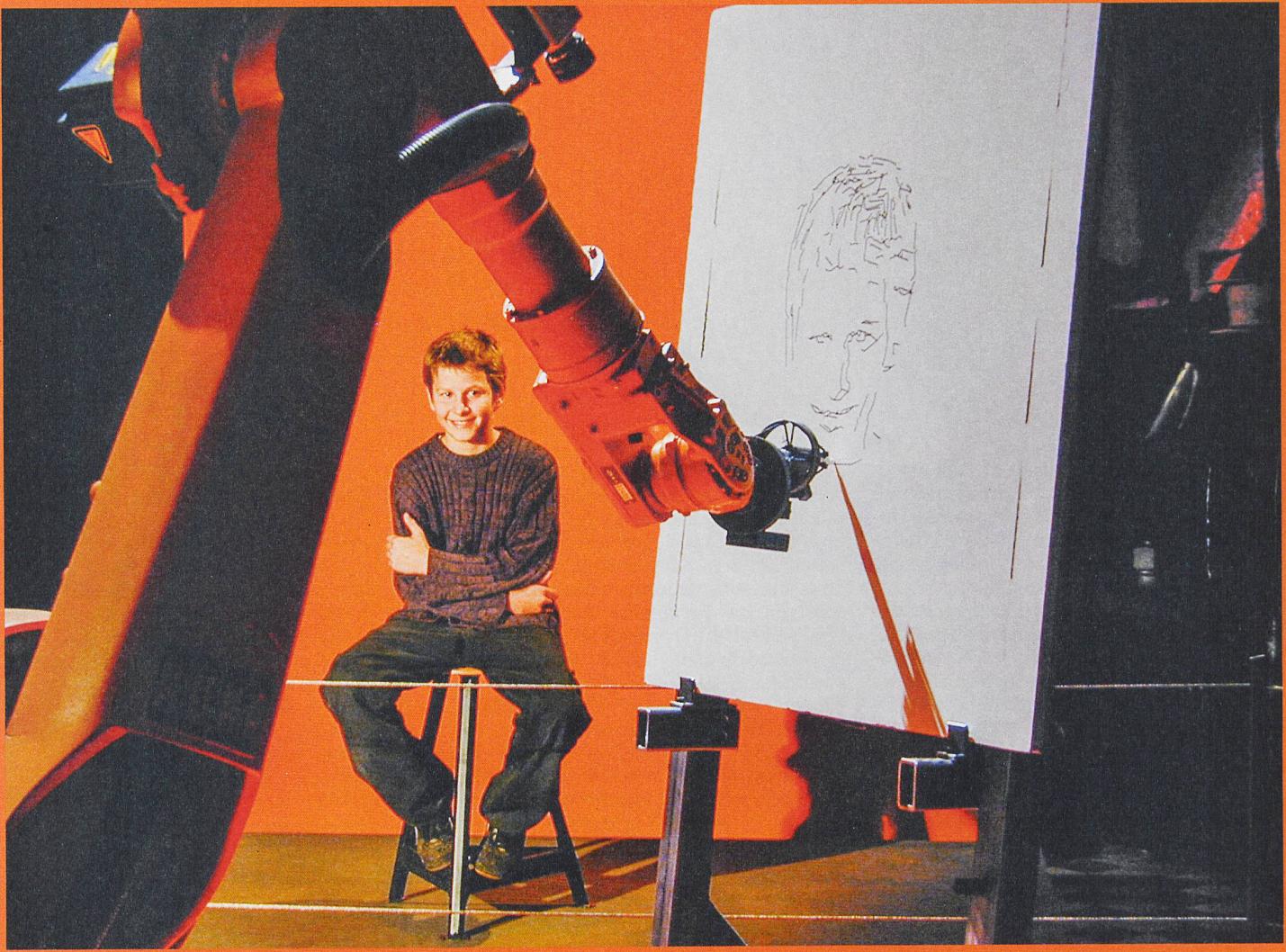
le système attribue une «récompense» liée aux résultats générés par l'algorithme. Celui-ci s'adapte pour la maximiser. Application typique: apprendre à jouer aux échecs.

• Réseau de neurones artificiels:

ce modèle inspiré par l'architecture du cerveau comprend une grande collection de neurones artificiels interconnectés. Il recombine les propriétés de l'objet analysé pour en créer des représentations de plus en plus complexes et abstraites et, par exemple, le classer. Lors de l'apprentissage, le réseau teste de nouvelles combinaisons.

pourquoi il le fait. Il raconte aussi que son équipe souhaitait inclure Adam et Eve dans la liste des auteurs de leurs contributions mais qu'on leur a répondu que c'était impossible parce qu'ils ne pouvaient pas donner leur accord. Il ne doute cependant pas que les automates intelligents prendront toujours plus de place dans les sciences, portés par le pouvoir croissant des ordinateurs, de meilleurs algorithmes et les progrès de la robotique. «Les machines s'améliorent sans cesse alors que les hommes ne changent pas, dit-il. Il n'y a pas de raison que cette évolution s'arrête.»

Basé à Rome, Edwin Cartlidge écrit pour les revues *Science* et *Nature*.



Un bras robotique tire le portrait d'un visiteur. Le stylo ne tremble pas, mais l'algorithme qu'il suit à la lettre ne laisse aucune place à l'interprétation.

Photo: robotlab (2002)

La science augmentée

L'intelligence artificielle est entrée dans le quotidien des chercheurs. Révolution scientifique ou simple outil, elle offre des possibilités inédites à ceux qui savent en profiter.

Par Roland Fischer

Les machines intelligentes et autres systèmes capables d'apprendre de manière autonome contribuent déjà à la recherche, et ce, depuis des décennies. Les premiers essais d'apprentissage automatique pour identifier des motifs dans le code génétique datent de plus de vingt ans. Et la physique des particules teste l'intelligence artificielle (IA) depuis si longtemps qu'au tournant du siècle, le milieu dénonçait une baisse d'intérêt et lançait des appels à redynamiser cette approche.

«Le CERN a mené des expériences avec les réseaux neuronaux dans les années 90», note Sigve Haug du Laboratoire de physique des hautes énergies de l'Université de Berne. Mais on ne parlait à l'époque simplement pas encore de «machine learning».

Aujourd'hui, le recours à l'IA dans les grandes expériences de physique des particules n'a plus rien d'extraordinaire, que ce soit pour l'analyse des données ou leur reconstruction. L'informatique distribuée l'utilise aussi régulièrement dans les programmes qui optimisent la répartition des tâches entre plusieurs centres de calcul. Mais l'IA n'est pas seulement omniprésente au CERN. On la retrouve désormais en chimie physique, biologie moléculaire, génétique médicale, astrophysique et humanités digitales. Partout où il y a du big data, des grandes quantités de données à traiter.

Faut-il se préparer à la prochaine étape, qui pourrait voire l'intelligence artificielle se glisser dans des assistants de laboratoire d'un nouveau genre et faire émerger des équipes composées d'hommes et de machines? «Absolument», avance Karsten Borgwardt du Machine Learning and Computational Biology Lab à ETH Zurich. On ne peut déjà plus s'en passer dans de nombreux domaines des sciences de la vie qui exigent de travailler avec des procédés à haut débit.» Comme découvrir des liens dans les données génétiques d'un demi-million de dossiers médicaux.

Les quantités de données deviennent tout simplement trop importantes, note le chercheur: «Personne n'est capable d'identifier à l'œil nu une structure significative

encore inconnue.» Face à de tels volumes d'informations, il est indispensable de développer des procédures d'analyse statistique efficace, à l'instar du jeune professeur. Pour lui, la frontière entre statistique et apprentissage automatique s'estompe toujours plus.

La science dopée

L'intelligence artificielle comme partenaire du chercheur: l'idée rappelle le concept de l'«Advanced Chess» formulé par Garry Kasparov peu après sa défaite contre Deep Blue il y a exactement vingt ans. Il estimait qu'à l'avenir, les parties ne devraient plus opposer des humains entre eux ou à un ordinateur, mais plutôt des équipes composées d'humains et de machines. Les échecs pourraient ainsi atteindre un tout autre niveau, bien au-delà des stratégies à portée de notre espèce.

«L'apprentissage automatique, c'est la science sous stéroïdes», écrit Pedro Domingos dans «The Master Algorithm». Le spécialiste en IA à l'Université de Washington y postule l'existence d'un algorithme d'apprentissage surpuissant capable de tout comprendre. Son utilisation intensive rendrait la recherche plus rapide, efficace et profonde. Libérés des procédures statistiques routinières, les scientifiques se concentreraient entièrement sur la composante créative de leur travail. Pour Pedro Domingos, il ne s'agit rien de moins que l'avènement d'un nouvel âge d'or des sciences.

«L'apprentissage automatique, c'est la science sous stéroïdes.»

Pedro Domingos

Mais tous les chercheurs familiers de l'IA n'entonnent pas aveuglément ce type de louanges. Comme Neven Caplar de l'Institut d'astronomie d'ETH Zurich, un passionné des données: il leur consacre son

blog astrodataiscool.com et a utilisé l'apprentissage automatique pour quantifier les biais sexistes dans les publications en astronomie. Le jeune chercheur constate bien une progression significative des publications liées à l'IA, mais il se demande encore si elle s'imposera dans son domaine de recherche. L'astronomie est «une science sujette à pleine de distorsions» où le contrôle des instruments joue un rôle essentiel. C'est pourquoi il faut éviter autant que possible d'en faire une boîte noire, un outil peut être pratique qui livre de bons résultats mais dont on ne comprend pas le fonctionnement. L'interprétation humaine continue de jouer un rôle central pour traiter les données issues d'observations, soutient Neven Caplar.

Un outil comme un autre

«Ah! ces boîtes noires!» s'exclame son collègue Kevin Schawinski (voir également «Galaxies citoyennes», p. 30). Tout le monde reproche à l'IA de ne pas nous permettre de comprendre la logique suivie, et de la remettre en question. Pas lui: «Je ne vois aucune boîte noire. Il s'agit simplement d'une méthode scientifique qu'il faut calibrer et tester pour bien la comprendre. Cela a toujours été le cas lorsque la science s'est approprié une nouvelle technique.» Après tout, aucun chercheur ne comprend dans leur intégralité des dispositifs expérimentaux aussi complexes que le Grand collisionneur de hadrons (LHC) du CERN ou le télescope Hubble. Il faut faire confiance à la communauté scientifique. Pour l'astrophysicien, elle devrait pouvoir bien s'assurer de la rigueur de la procédure, également dans le cas de l'intelligence artificielle.

Kevin Schawinski a lancé avec des informaticiens la plateforme Space.ml qui réunit un ensemble d'outils d'interprétation des données astronomiques faciles à utiliser. Il a mis au point une méthode pour optimiser des images de galaxies à l'aide d'un réseau de neurones afin d'en extraire davantage d'informations sans que l'ordinateur ait besoin d'instructions supplémentaires. D'autres applications demandent

«L'apprentissage automatique se trouve toujours dans un équilibre précaire entre aveuglement et hallucination.»

Pedro Domingos

un apprentissage supervisé qui utilise des données d'entraînement. Choisies spécialement et étiquetées à la main, elles aident l'ordinateur à formuler lui-même des règles qui lui permettront d'exécuter une tâche.

Des algorithmes trop zélés

Le biostatisticien Karsten Borgwardt se sert par exemple de l'apprentissage supervisé pour découvrir si certaines modifications du génome pourraient avoir des effets néfastes sur l'organisme. Il nourrit l'ordinateur d'exemples déjà connus dans l'espoir qu'il trouvera de lui-même de nouvelles corrélations.

Mais un problème existe: l'overfitting. Il faut toujours se demander si l'ordinateur a reconnu des caractéristiques essentielles du système étudié ou si, au contraire, il finit par se noyer dans la mer de données et surinterprète ce qui ne sont en fait que de simples corrélations dues au hasard. Pour Pedro Domingos, l'apprentissage automatique se trouve toujours dans «un équilibre précaire entre aveuglement et hallucination»: l'algorithme risque soit de ne rien identifier soit de percevoir des choses qui n'existent pas - l'overfitting. Un système peut «trop apprendre», et tout entraînement supplémentaire ne fait qu'aggraver la situation.

Une des principales raisons de l'overfitting en génomique et en médecine vient d'un certain manque de transparence des données d'entraînement, explique Karsten Borgwardt. Cela empêche d'évaluer correctement dans quelle mesure elles correspondent à la situation concrète qu'on veut étudier. Si l'entraînement manque de variété, la machine ne parviendra peut-être pas à généraliser suffisamment. Ses recouplements ne correspondront qu'à un simple appris par cœur, et l'intelligence artificielle ne vaut pas mieux qu'une banque de données usuelle. Impossible dans ce cas de gérer de nouvelles connaissances.

Même si tout fonctionne parfaitement durant la phase de formation, il faut encore distinguer les corrélations purement aléatoires de celles qui présentent une véritable signification statistique, poursuit Karsten Borgwardt. L'augmentation du volume de

données génétiques accroît le risque de tomber sur des variantes du génome qui coïncident avec la présence d'une maladie mais sont en fait apparues suite au hasard. Une partie essentielle du travail consiste à identifier des indices statistiquement significatifs dans des espaces à dimensions extrêmement nombreuses. Autrement dit: être en mesure d'analyser rigoureusement aussi des situations très complexes et multifactorielles.

L'apprentissage automatique reste encore peu répandu en chimie physique mais suit une «progression rapide» dans ce domaine, relève Anatole von Lilienfeld de l'Université de Bâle. Ce spécialiste des matériaux estime que l'IA «constituera inévitablement une composante à part entière de la plupart des recherches dans dix ans».

«L'interprétation humaine continue de jouer un rôle central pour traiter les données issues d'observations.»

Neven Kaplar

Son groupe réalise un travail de pionnier: il a calculé grâce à l'IA les propriétés de millions de cristaux qui peuvent - en théorie - être construits à partir de quatre éléments de base. La machine a notamment identifié 90 structures inconnues à ce jour suffisamment stables du point de vue thermodynamique pour être intéressantes comme nouveaux matériaux potentiels. Même le spécialiste se dit impressionné par le gain d'efficacité engendré par l'IA dans le calcul des propriétés des cristaux, effectué par l'IA des millions de fois plus rapidement. Une amélioration telle qu'elle «permet non seulement de résoudre des problèmes conventionnels, mais ouvre carrément de nouveaux champs de recherche».

Le chimiste formule cependant lui aussi certaines réserves: l'apprentissage automatique ne fonctionne qu'en présence d'un

principe défini de cause à effet, et lorsque suffisamment de données sont disponibles. Autre condition décisive: «Le chercheur doit posséder une expertise suffisante pour concevoir une représentation efficace du système étudié et de ses propriétés.»

Ce type d'expertise est également capital pour Guiseppe Carleo d'ETH Zurich. Le physicien théoricien a trouvé le moyen de reproduire grâce à un réseau de neurones la fonction d'onde de systèmes quantiques. Une fois ce pas franchi, son optimisation n'a représenté «qu'un jeu d'enfant». L'algorithme l'a effectuée rapidement et sans problème, alors que les méthodes traditionnelles atteignent vite leurs limites pour de tels volumes de calculs. La simulation de systèmes quantiques complexes semblait jusqu'à récemment «une chose impossible».

La nouvelle approche s'appuie sur la méthode de l'apprentissage non supervisé dans lequel l'ordinateur apprend sans bénéficier de savoir préalable. En physique théorique, elle permet de considérer «de vieux problèmes sous de nouvelles perspectives». Le physicien s'est d'ailleurs inspiré du triomphe de l'algorithme AlphaGo contre l'un des meilleurs joueurs de go mondiaux. Ce programme a progressé en menant d'innombrables parties contre lui-même et la méthode utilisée - l'apprentissage par renforcement - a projeté son intelligence stratégique dans des sphères totalement inédites.

Guiseppe Carleo a repris cette approche et l'a adaptée à ses objectifs. Pour simplifier, il a demandé à la machine de considérer le problème de la fonction d'onde comme un jeu dans lequel l'objectif est bien défini, mais le chemin pour l'atteindre est totalement libre. Elle devait apprendre d'elle-même à choisir les meilleures solutions. L'IA s'est prise au jeu. Au point qu'elle maîtrise désormais la physique quantique mieux que ceux qui l'ont développée.

Roland Fischer est journaliste libre et travaille à Berne.



Voudra-t-on célébrer l'anniversaire d'un robot? Sera-t-il programmé pour éprouver de la joie, ou est-ce que d'autres sentiments plus ambigus pourraient surgir? L'artiste Kevin Grennan s'interroge – ici avec l'aide d'une actrice – sur l'empathie pouvant exister entre humains et machines.

Image: Kevin Grennan, Android Birthday, 2011. Video.

Actor: Sylvi Kim

Un assistant dans les pattes

Des startups proposent des algorithmes «intelligents» pour mieux gérer la littérature scientifique. Ces outils doivent encore faire leurs preuves. *Par Sven Titz*

Après les échecs, le poker et les voitures autonomes, les machines intelligentes s'attaquent à l'une des activités humaines les plus complexes: la recherche scientifique. Des algorithmes doivent filtrer les millions de publications scientifiques apparaissant chaque année et faciliter leur évaluation par peer review.

Corrélations trompeuses

Les entreprises commercialisant ce genre de produits semblent pécher par excès d'optimisme. La startup norvégienne Iris promet d'améliorer la recherche d'études scientifiques pertinentes. A partir d'un article donné, son interface livre des centaines de résultats classifiés par «concept-clés». Mais une partie des résultats ne vaut rien: l'algorithme a établi des liens entre des concepts qui n'ont rien à voir entre eux.

Semantic Scholar, un moteur de recherche de littérature scientifique, existe depuis deux ans. Conçu en Californie par l'Allen Institute for Artificial Intelligence, il utilise l'apprentissage automatique afin d'identifier les concepts scientifiques dans les textes, pour l'instant dans les domaines de l'informatique et des neurosciences. Paul Ginsparg de l'Université Cornell, un co-fondateur de la plate-forme de preprint scientifiques Arxiv, met en avant une qualité de Semantic Scholar: il ne prend pas seulement en considération le nombre de

citations d'un article, mais aussi leur importance, à savoir qui a mentionné une étude et dans quel contexte. Une méthode «qui devrait s'avérer plutôt utile».

Les moteurs de recherche intelligents tels que Semantic Scholar ou Sparrho se basent essentiellement sur les banques de données de littérature académique Google Scholar et Pubmed. Ils ont été rejoints ces derniers mois par des produits similaires, Microsoft Academic et Recommended de Springer Nature.

Retracer l'évolution des concepts

D'autres sociétés sont plus ambitieuses. A Toronto, la startup Meta développe son propre procédé pour scanner la littérature spécialisée avec des réseaux de neurones à plusieurs couches. Il serait à même de retrouver l'origine d'un concept scientifique, en remontant dans le temps à travers tout un champ de recherche, affirme la société. Un produit destiné à l'industrie pharmaceutique, aux éditeurs, aux instituts de recherche et aux autorités. Une partie des algorithmes ont été créés par la société qui a développé le logiciel de Siri, l'assistant vocal d'Apple. Meta a été récemment rachetée par l'Initiative Chan Zuckerberg. Mais Meta reste encore une boîte noire aux yeux des experts, que ce soit Jana Koehler de la Haute école de Lucerne ou Peter Flach de l'Université de Bristol: ils disent manquer d'informations pour l'évaluer.

«La difficulté est d'intégrer de manière pertinente les compétences particulières des humains.»

Peter Flach

Des formes élémentaires d'intelligence artificielle sont déjà utilisées pour évaluer des publications scientifiques. Peter Flach et ses collègues ont développé le programme open source Subshift pour trouver des experts compétents afin de juger un article. Les algorithmes cherchent les concordances dans le vocabulaire décrivant à la fois les articles et les experts. Pour le chercheur de Bristol, c'est une défi considérable de concevoir des logiciels qui vont au-delà des fonctions courantes telles que la concordance («matching»): «La difficulté est d'intégrer de manière pertinente les compétences particulières des humains.»

Le journaliste scientifique indépendant Sven Titz habite Berlin.



Les algorithmes de l'installation «Refactor» génèrent une peinture défilante qui se renouvelle continuellement. Ils se basent notamment sur les mouvements du peintre Nikzad Arabshahi enregistrés pendant deux semaines.

Photo: Nikzad Arabshahi (Visual) & Vedad Famourzadeh (Audio), décembre 2016

Une nouvelle intelligence qui s'ignore

Que vaut une découverte si on ne peut la comprendre? L'arrivée des machines intelligentes dans les laboratoires interroge l'essence même de la connaissance. *Par Nic Ulmi*

Formuler des hypothèses, faire des découvertes: ces termes sont au cœur de la démarche scientifique. Depuis le début des années 2000, des machines dotées d'intelligence artificielle ont commencé à s'engager sur ce terrain. Elles développent de nouvelles manières de produire des résultats et assument un rôle qu'on imaginait autrefois réservé aux seuls humains. De plus en plus performantes, mais dépourvues de la capacité de comprendre leurs propres réussites, ces machines laissent entrevoir une vision déroutante: une recherche scientifique automatisée, robotisée, industrielle.

Trois exemples pour commencer. A l'Université Tufts au Massachusetts, un réseau de neurones artificiels s'est attaqué à une vieille énigme de la biologie en formulant une hypothèse sur la régénération du planaire, un ver d'eau douce qui sait faire repousser sa queue ou sa tête lorsqu'il les perd. Un autre, à l'Université d'Adelaide en Australie, a découvert le moyen optimal de produire un condensat de Bose-Einstein, un ensemble de bosons refroidi près du zéro absolu qui rend apparents des phénomènes quantiques macroscopiques. Et les machines de la startup Insilico Medicine à l'Université Johns Hopkins de Baltimore ont mis au point des molécules potentiellement utiles en oncologie.

«Nos esprits peuvent effectuer un travail d'abstraction sans effort.»

Roger Schank

Vétérain de l'intelligence artificielle (IA), Roger Schank ne se montre pas du tout convaincu. «Tout cela, ce n'est absolument pas de l'intelligence artificielle», proteste-t-il. Le chercheur, actif aux Universités Yale, Northwestern et Carnegie-Mellon, redoute la répétition d'un scénario connu. Au début des années 1970 et à la fin des années 1980,

deux vagues de hype autour de l'intelligence artificielle font place à des «hivers de l'IA»: les attentes excessives commencent à retomber, l'intérêt du public entre en hibernation, les fonds sont gelés. «La presse s'y donne maintenant à cœur joie, mais elle passera ensuite à autre chose. Le problème, c'est qu'entre-temps la recherche sur l'IA risque d'être tuée une fois de plus. Cela ne m'amuse pas.»

Le steak et le coiffeur

De quoi s'agit-il, si ce n'est pas de l'intelligence? «Les exemples que vous citez sont en fait des programmes de pattern matching (filtrage de motif, ndlr), répond Roger Schank. C'est le procédé utilisé par Facebook pour identifier votre visage sur des photos.» Autrement dit, les machines génèrent des motifs (le schéma d'une molécule, le plan de régénération d'un ver planaire) qu'elles comparent ensuite à des régularités identifiables dans des bases de données préexistantes, passant ces dernières au peigne fin. «Mais la manière dont les scientifiques font des découvertes est tout autre: elle commence par le fait d'être désorienté. L'incompréhension que vous ressentez face à un phénomène vous conduit à formuler une hypothèse, puis à la tester. C'est ce processus, précisément, qu'on appelle science.»

Roger Schank aime raconter une histoire pour illustrer la différence entre la découverte humaine et l'apprentissage automatique. Il l'appelle «Le steak et la coupe de cheveux»: «Je discutais avec un collègue à Yale, me plaignant que je ne parvenais jamais à me faire servir un steak saignant: la viande arrivait toujours sur ma table trop cuite. Pourquoi diable? me demandais-je. Pour toute réponse, le collègue me dit: j'ai vécu en Angleterre, autrefois, et là-bas aucun coiffeur n'arrivait à me faire une coupe en brosse. Eurêka! Chacune des deux histoires explique l'autre: en passant à un niveau d'abstraction supérieur, on se rend compte qu'elles sont identiques. Nous avons affaire, dans les deux cas, à des per-

«La manière dont les scientifiques font des découvertes commence par le fait d'être désorienté.»

Roger Schank

sonnes qui sont bien capables de fournir le service qu'on leur demande, mais qui ne parviennent pas à obtempérer, car elles jugent nos requêtes trop extrêmes.» Moralité de l'histoire? «Nos esprits savent effectuer ce travail d'abstraction sans effort. Ils sont en mesure de regarder une chose comme si elle était une autre. Ils sont motivés par le fait que nous avons naturellement des objectifs: rassasier notre appétit, ou satisfaire une curiosité mise en branle par une situation qui nous rend perplexes.»

C'est ainsi que fonctionne notre cerveau. Mais la nouvelle vague de recherches et d'applications dans le domaine de l'IA, née à la fin des années 1990, ne vise plus à reproduire le modèle de cognition de l'esprit humain. Ce tournant mène vers un type de connaissance inédit, où le savoir est produit par apprentissage automatique à partir des mégadonnées. Cette bifurcation a tiré l'IA de sa léthargie et a permis les suggestions d'Amazon, à Siri, à la victoire d'AlphaGo sur l'un des meilleurs joueurs de go au monde, ou encore à prédire l'expression des gènes d'une bactérie, selon une étude de l'Université de Pennsylvanie de 2016.

Cette technologie peut-elle véritablement produire de la science? Ou faut-il pour cela un besoin existentiel de comprendre, un désir de connaître, une «libido sciendi», comme aurait dit saint Augustin - autant de choses qu'une machine ne saurait avoir?

La théorie du fun

On se tourne vers Jürgen Schmidhuber, codirecteur de l'Institut Dalle Molle de recherche en intelligence artificielle (Idisia) à Lugano. «Lorsque l'IA aura grandi, elle l'appellera peut-être «papa», écrivait à propos de lui le New York Times en novembre 2016. Le chercheur a notamment développé en 1997 l'approche de la «long short-term memory», utilisée aujourd'hui par les programmes de reconnaissance du langage parlé. Il considère qu'un même système de récompense peut être à l'œuvre dans le cerveau des scientifiques, des artistes et des bébés, ainsi que dans les réseaux de neurones

artificiels. Ces différentes formes d'intelligence peuvent éprouver une forme de plaisir lorsqu'elles arrivent à identifier, dans le désordre du monde, des récurrences et des régularités qui leur étaient inconnues.

«Imaginez un programme qui doit décliner une séquence d'images montrant cent pommes en train de tomber, explique le chercheur. Sans connaître la force de la gravité, il aura besoin d'un nombre considérable de bits pour encoder les données. Mais après avoir découvert cette régularité, il pourra l'utiliser pour faire des prédictions et moins de bits lui seront nécessaires. Cette différence entre avant et après, donc cette compression des données, mesure la profondeur de la nouvelle connaissance acquise par réseau. Cela déclenche un signal de récompense: un moment de joie intérieure pour le réseau, si vous voulez.»

Jürgen Schmidhuber formalise ce mécanisme de récompense dans sa théorie formelle du fun et de la créativité. Pour lui, il se manifeste chez le musicien surpris par une harmonie nouvellement créée, et expliquerait également l'humour: «Lorsque la chute d'une blague fait apparaître un schéma inattendu dans le récit, elle permet tout à coup d'en compresser les données. C'est alors qu'on rit.» Ce phénomène est crucial pour programmer des machines dotées de curiosité artificielle et susceptibles de faire des découvertes.

Pour cela, le réseau doit fonctionner comme un duo, explique le chercheur: «D'un côté, le contrôleur exécute des actions et mène des expériences générant des données; il est motivé par la maximisation des récompenses reçues. De l'autre côté, un modèle envoie une rétribution à chaque fois que la découverte d'une nouvelle régularité lui permet de compresser les données. C'est un tel système qu'il faut mettre en place si l'on veut construire un scientifique artificiel.»

Une science aléatoire

Le réseau neuronal d'Insilico Medicine recourt à un tel système dual, explique

Polina Mamoshina, généticienne et informaticienne associée au projet. «Le générateur est programmé pour créer de manière virtuelle et aléatoire des structures moléculaires. Le discriminateur s'entraîne avec des bases de données à reconnaître des molécules capables d'inhiber la croissance des tumeurs. Initialement, le but du générateur est de piéger le discriminateur, ce qui amène ce dernier à faire de fausses identifications, tout en lui permettant de s'améliorer par la suite.»

«La chute d'une blague permet tout à coup de compresser les données. C'est alors qu'on rit.»

Jürgen Schmidhuber

Parmi les 60 molécules trouvées par le générateur et validées par le discriminateur, certaines existaient déjà et avaient été brevetées comme agent thérapeutique contre le cancer. «C'est une indication encourageante sur la précision du système, poursuit Polina Mamoshina. Nous allons maintenant entamer le processus de validation des autres molécules *in vitro*, puis *in vivo*.» Pour la chercheuse, cette approche révolutionne le domaine: au lieu de cibler à l'aveugle une grande quantité de composés, le but est de créer des médicaments sur demande.

En attendant les machines curieuses de Jürgen Schmidhuber et des systèmes à l'aise avec l'histoire du steak et de la coupe de cheveu de Roger Schank, l'apprentissage automatique et les mégadonnées sont en train de redéfinir la nature de la pratique scientifique. A l'Université de Bristol, le professeur d'intelligence artificielle Nello Cristianini prend le parti d'embrasser ces nouveaux outils, tout en appelant à délimiter leur champ d'application: «Je travaille avec le machine learning depuis vingt ans. J'ai le plaisir d'affirmer qu'il

fonctionne. La machine apprend, dans le sens où elle améliore ses performances avec l'expérience.»

Ce sont ces approches qui se cachent derrière une partie énorme des bénéfices d'Amazon lorsque les bons livres se voient recommandés à la bonne personne. «Il faut souligner que ces algorithmes ne contiennent pas un modèle psychologique de chaque utilisateur ni un modèle de critique littéraire pour chaque livre», poursuit Nello Cristianini. Ils mènent un raisonnement purement statistique: des gens ayant telle caractéristique et tel comportement ont acheté des livres ayant telle particularité. Cela signifie une chose importante: on peut faire une prévision sans avoir une théorie.»

«Je travaille avec le machine learning depuis vingt ans. J'ai le plaisir d'affirmer qu'il fonctionne.»

Nello Cristianini

Mais peut-on vraiment transposer ce modèle à la science? «Il n'y a pas de raison philosophique pour que cela soit impossible», répond le chercheur. Un ordinateur pourrait générer des modèles de molécules et prédire leur toxicité. Ce qu'on gagne? La capacité de mettre au point un médicament *in silico*, sans être obligé de produire toutes les molécules possibles et de les tester sur des souris. Ce qu'on perd? Le moyen de savoir pourquoi le médicament agit.»

L'apprentissage automatique constitue une boîte noire, car il ne nous permet pas de comprendre le raisonnement suivi par la machine. Cette opacité se révèle particulièrement épingleuse en dehors du monde

académique, note le chercheur, «lorsque des algorithmes déterminent l'accès à des droits: être admis dans une école ou éligible pour une assurance, bénéficier de la liberté conditionnelle...»

La fin de la théorie?

Ce type d'apprentissage, est-ce encore de la science? «Il ne faut pas se leurrer, poursuit Nello Cristianini. Si le machine learning fonctionne pour faire de l'argent avec des prévisions correctes, cela aboutira à redéfinir progressivement ce qu'on entend par science. Les fonds pour la recherche suivront les applications pratiques, et les autres approches risqueront d'avoir des difficultés de financement.» Doit-on craindre «la fin de la théorie», comme le proclamait Chris Anderson? En 2008, le responsable du magazine *Wired* affirmait que «le déluge des données rend la méthode scientifique obsolète».

«Nous devons nous demander quel est le but des théories», répond Nello Cristianini. Pour moi, la réponse est extrêmement claire. Faire une belle théorie de la mécanique ou de la thermodynamique, comprendre un morceau de notre univers, cela représente une valeur culturelle infinie. Nous avons besoin de connaître le fonctionnement du monde et de nous-mêmes.» Une bonne théorie a une valeur concrète: «Une prévision de type boîte noire n'est pas suffisante lorsque l'enjeu est très élevé, par exemple lorsqu'on envoie une sonde sur Mars ou planifie une opération chirurgicale. Dans ces cas, on veut savoir exactement ce qui se passerait si on changeait tel ou tel paramètre. Cela implique un raisonnement contrefactuel, qu'on ne peut aborder que par des théories.»

D'un côté, des machines probabilistes. De l'autre, des êtres mus par un désir de comprendre, enraciné dans leurs fonc-

tions biologiques et générateur de théories. Les premières remplaceront-elles les seconds? «Ce qu'on pourra confier aux machines, ce seront des tâches spécifiques», avance Nello Cristianini. Exemples? «Etant donné une séquence d'acides aminés, dessine-moi la protéine. A partir d'un génome humain complet - trois milliards de lettres -, trouve-moi les 20 000 gènes qui le composent... Mais déterminer la signification et l'importance de la découverte, cela restera une tâche humaine.»

Le même partage du travail peut s'appliquer dans les sciences sociales: «Je travaille avec des historiens pour mesurer les transitions historiques dans la culture anglaise et italienne à partir de la lecture systématique des journaux. Personne ne peut lire 500 millions d'articles: la machine les parcourt donc pour nous. C'est pourtant l'historien qui explique ensuite pourquoi tel ou tel résultat est important.»

Complémentarité: Jürgen Schmidhuber en est également convaincu. «Dans les laboratoires scientifiques comme ailleurs, les machines rempliront des tâches fastidieuses dont, au fond, les humains ne voudraient pas. Bien sûr, cela va supprimer des postes de travail. Il faudra donc réagir en tant que société pour distribuer les gains. Cela passera par un revenu inconditionnel, des impôts sur les robots ou autre chose.»

Les questions sociales soulevées par la robotisation des sciences restent aussi ouvertes que les questions épistémologiques. Une prédiction automatique est-elle un savoir scientifique? Nello Cristianini relève ce défi: «Je viens tout juste d'engager deux philosophes des sciences pour commencer à réfléchir à cette question.»

Nic Ulmi est journaliste indépendant à Genève.



H starts to shake.

H (CONT'D)

It may never be forgiven, but
that is just too bad. I have to
leave, but I'm not free of the
world.

C

Yes. Perhaps I should take it
from here. I'm not going to do
something.

H

You can't afford to take this
anywhere. It's not a dream. But
I've got a good time to stay
there.

C

Well, I think you can still be
back on the table.

H

Mmm. It's a damn thing scared to
say. Nothing is going to be a
thing but I was the one that got
on this rock with a child and
then I left the other two.

He is standing in the stars
and sitting on the floor.

Le programmeur Ross Goodwin et le réalisateur Oscar Sharp ont conçu Benjamin, le «premier générateur automatique de scénarios». Ils l'ont nourri avec des scripts d'une centaine de films de science-fiction. Le résultat est un film déroutant de huit minutes: Sunspring. Il s'avère difficilement accessible à une intelligence humaine.

Image: thereforefilms.com/sunspring