

Comme depuis longtemps au jeu d'échecs, maintenant également dans l'analyse spectrale

## Le Dr. rer. nat. encense l'intelligence artificielle

Il fût un temps où il fallait rentrer chaque ordre individuellement dans un système analytique ou au minimum programmer ces ordres dans un logiciel. Aujourd'hui, il suffit de saisir de «grande quantité de données» et le système apprend de manière indépendante – par exemple il peut lire des spectres et effectuer des calculs à l'avance. En sus du «Big Data», une deuxième tendance vers «le petit et le beau» se manifeste grâce à la production de petits spectromètres portables et de surcroît pratiques.

Dans de nombreux cas, le mot magique aujourd'hui est «intelligence artificielle». Son utilisation tous azimuts est évidemment révolutionnaire. «Elle permet en principe d'optimiser tous les processus déterministes» explique le Prof. Dr. Anatole von Lilienfeld de la Faculté de chimie de l'Université de Bâle qui en est convaincu.

### Grande puissance de calcul

L'accent est mis sur l'expression «tout le monde». En effet, le potentiel de l'intelligence artificielle peut être exploité dans de nombreux domaines. Cependant, en raison de ses normes particulièrement élevées, la recherche en chimie

représente un sommet plus difficile à gravir par rapport à d'autres disciplines. Malgré tout, les échanges entre l'université et l'industrie permettent d'atteindre ses sommets.

«Nous avons par exemple récemment démontré cela pour Novartis lors de la catégorisation auto-

Les spectromètres NIR portables permettent d'analyser des échantillons même en dehors du laboratoire.



### ILMAC LAUSANNE 2020

|                    |                                    |
|--------------------|------------------------------------|
| Durée              | Mercredi 7 et jeudi 8 octobre 2020 |
| Heures d'ouverture | 9h00 à 17h00                       |
| Lieu               | Expo Beaulieu Lausanne, Hall 7     |
| Organisateur       | Foire MCH Suisse (Bâle) SA.        |
| Courriel           | info@ilmac.ch                      |
| Internet           | www.ilmac.ch/ILMACLAUSANNE         |

matisée des spectres toutes les millisecondes» rapporte le Prof. von Lilienfeld. «Jusqu'à présent, ce travail nécessitait d'être titulaire d'un doctorat en chimie analytique. Une durée d'environ 20 minutes par spectre était nécessaire avec un taux d'erreurs plus élevé qu'avec l'intelligence artificielle que nous utilisons aujourd'hui.»

Un grand nombre de nouveaux développements sont en cours dans le domaine de la spectroscopie. Par exemple, les chercheurs utilisant des méthodes d'IA sont maintenant en mesure de prédire les spectres infrarouges aussi bien pour des petites molécules que pour des molécules plus grandes et plus complexes. La base est

constituée de réseaux neuronaux ayant la capacité «d'apprendre de l'expérience». Dans la pratique, on pourrait imaginer par exemple qu'un spectre mette en évidence une substance inconnue. Il est possible de la simuler et finalement de l'identifier sans l'avoir synthétisée ou mesurée; ceci sans jamais avoir mesuré son spectre IR. Les bibliothèques de spectres déjà existantes pourraient également être considérablement étendues grâce au calcul de nouveaux spectres.

#### Petits systèmes d'analyse

Outre l'énorme soutien de l'intelligence artificielle, la miniaturisation des appareils spectros-

copiques est impressionnante. Par exemple, l'espace requis pour les spectromètres Raman est passé en quelques années seulement «d'une pièce complète» à la «paume de la main». Cela vaut pour les systèmes d'analyse portables, aussi bien en Raman qu'en spectroscopie infrarouge, proche infrarouge (NIR) ou moyen infrarouge.

Sous cette forme, les méthodes spectroscopiques mentionnées ci-dessus permettent potentiellement d'envisager un changement au niveau du marché. Par exemple, les spectromètres NIR ou Raman portables représentent une alternative au titrage Karl Fischer traditionnel lors de la détermination de la teneur en eau (humidité résiduelle). Il y a beaucoup à dire sur la spectroscopie: aucun échantillon n'est prélevé; une grande partie du risque de contact de substances toxiques avec le personnel est ainsi éliminé. L'absence de contacts du système d'analyse avec les échantillons permet en même temps d'éliminer une source principale d'erreurs pendant tout le processus d'analyse.

De ce fait, il n'y a plus besoin de consommables pour le laboratoire; ce qui constitue un avantage supplémentaire pour l'environnement.

Pour la maintenance prédictive, la surveillance et le contrôle des installations: les informations en provenance de tous les appareils sont disponibles afin de servir de base d'évaluation pour l'intelligence artificielle.





© Shimadzu



Ce système est idéal pour le développement des méthodes de diagnostic basées sur le MALDI et généralement pour le contrôle qualité des produits pharmaceutiques; il est idéal également pour les laboratoires de recherche et les laboratoires sous contrat dans le domaine des sciences et de l'industrie: spectromètres de masse Benchtop utilisés en mode linéaire dans un d'espace limité avec de nombreuses fonctions intelligentes.

Dans le cas de récipients transparents, les spectromètres miniatures effectuent leur travail de manière fiable et sont recommandés en particulier pour le contrôle d'identité à 100% des matières premières dans les marchandises entrantes. La tendance à la fabrication en continu (au lieu de la production par lots) entraîne le mar-

ché vers l'analyse humaine. Avec le spectromètre NIR ou Raman, le collaborateur se tient simplement devant une fenêtre d'observation afin de contrôler le processus en cours sur la ligne de production tout en obtenant son résultat sur place. Il est ainsi possible d'économiser l'étape de laboratoire et d'éviter de longs délais d'attente.

Les systèmes en ligne bénéficient également d'une demande croissante. Les sondes NIR et Raman sont installées en permanence dans le processus et peuvent être mises en réseau électroniquement si nécessaire. Ainsi, l'opérateur peut utiliser les données de spectroscopie et profiter de toutes les possibilités de l'intelligence artificielle lors de la surveillance et du contrôle de l'installation.

### Conception compacte, préparation automatisée d'échantillons

Les spectromètres de masse prennent de moins en moins de place tout en permettant à leur utilisateur de profiter de nombreuses fonctions intelligentes; il s'agit par exemple de la connexion directe de modules entièrement automatisés pour la préparation d'échantillons dans des appareils Benchtop- MALDI-MS utilisés en mode linéaire (par ex. MALDI-8020, Shimadzu). Les spectromètres de masse portables tels que ceux utilisés pour la détection de très petites quantités d'agents de guerre chimique sont encore plus compacts.

Pour terminer, revenons encore une fois au catalogage automatique des spectres: pourquoi le naturaliste ne devrait-il pas y perdre ici? Même aux échecs, les grands maîtres doivent aujourd'hui s'incliner face aux puissants ordinateurs. Un fait devient de plus en plus clair: nous sommes à l'aube de changements révolutionnaires dans le domaine de la chimie, de la pharmacie et des biotechnologies grâce à l'intelligence artificielle.

Cette année, les visiteurs pourront découvrir toutes la gamme des tendances et des innovations à l'ILMAC LAUSANNE.

Plateforme pour la chimie,  
la pharmacie et la biotechnologie

**ILMAC**  
LAUSANNE

7<sup>th</sup> and 8<sup>th</sup> October 2020 | Expo Beaulieu Lausanne | Hall 7

For the French-speaking part of Switzerland



Register now:  
[www.ilmac.ch/registration](http://www.ilmac.ch/registration)

Partners

