



HAL
open science

Aide à la conception

Juan Cortés, Thomas Schiex

► **To cite this version:**

Juan Cortés, Thomas Schiex. Aide à la conception. Le petit illustré, regards croisés de chercheur.es, 2020. hal-03436420

HAL Id: hal-03436420

<https://laas.hal.science/hal-03436420>

Submitted on 19 Nov 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Le Petit Illustré, Intelligence artificielle (IA) : Aide à la conception

Contributeurs :

Juan Cortés, LAAS-CNRS

Thomas Schiex, MIAT-INRAE

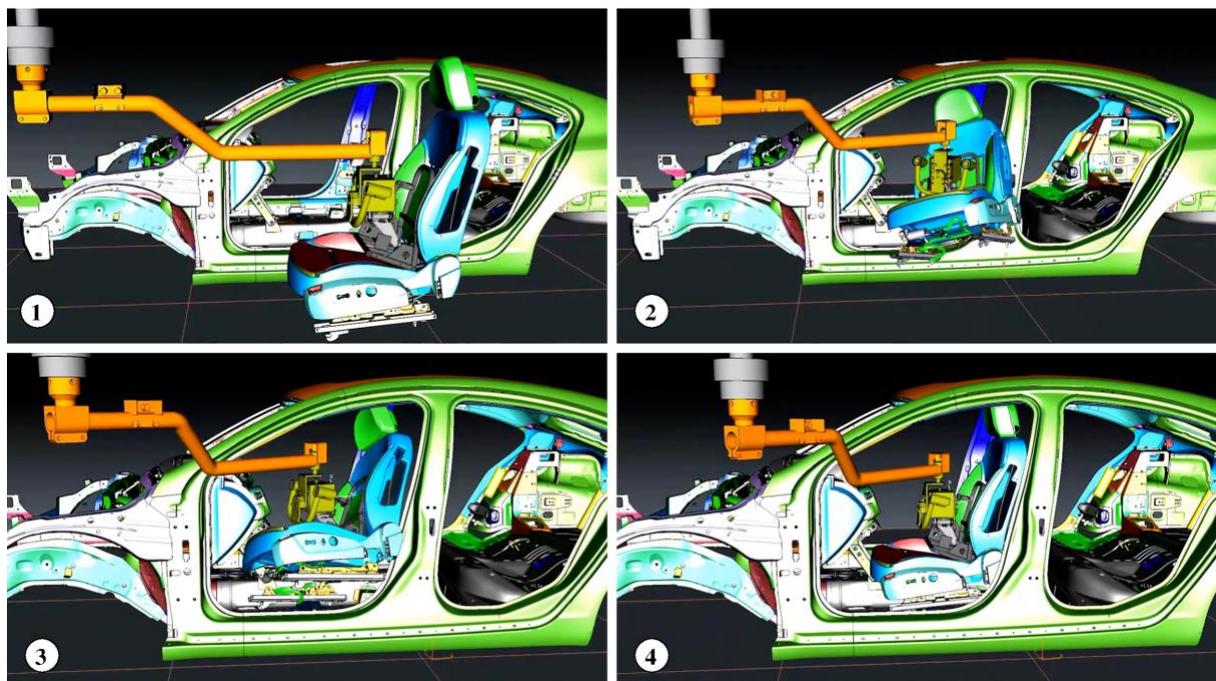
L'intelligence artificielle ne pouvait pas être absente du champ de la conception de nouveaux objets, mais elle doit répondre à des impératifs de forme variées.

La conception d'un nouvel objet, qu'il s'agisse d'une chaise ou d'une molécule, répond toujours à un objectif bien précis: créer un objet original et qui remplisse une fonction. De ce fait, la conception est un domaine où l'intelligence artificielle doit répondre à des impératifs de formes variées: une forme "logique" pour énoncer des propriétés incontournables imposées par la fonction visée, le temps, l'espace... et des préférences plus vagues, souvent difficiles à énoncer, mais qui s'inspirent de réalisations existantes, tout en ajoutant de nouvelles contraintes spécifiques, qui donneront à l'objet final toute son originalité. Le design est donc un lieu de rencontre entre l'intuition et la logique. La logique a toujours été très présente en intelligence artificielle, au travers en particulier du "raisonnement automatique". La disponibilité d'une intuition efficace, guidée par les observations et les données, est sans doute plus récente en intelligence artificielle : elle est le produit direct de l'apprentissage automatique (*machine learning*) et des réseaux de neurones profonds.

De la planification de trajectoires de robots à la CAO

Depuis plusieurs décennies, les outils de CAO (conception assistée par ordinateur) sont incontournables pour le développement de nouveaux produits dans l'industrie manufacturière en général, et en particulier dans les secteurs automobile et aéronautique. Les logiciels de CAO permettent d'accélérer le prototypage de pièces mécaniques et d'assemblages, grâce à la modélisation 3D et la simulation numérique. L'intégration dans ces logiciels d'algorithmes de planification de trajectoires,

initialement développés dans le domaine de l'IA pour la robotique, permet de concevoir les assemblages mécaniques en prenant compte des contraintes liées au mouvement relatif entre les différentes pièces lors des opérations de montage/démontage. Par exemple, ceci permet de garantir au moment de la conception qu'il sera possible de remplacer facilement un composant d'une voiture lors d'une étape d'entretien ultérieure. Dans ce contexte, les travaux pionniers des chercheurs du LAAS-CNRS ont donné lieu à la création de la start-up Kineo, qui fait actuellement partie du groupe Siemens.



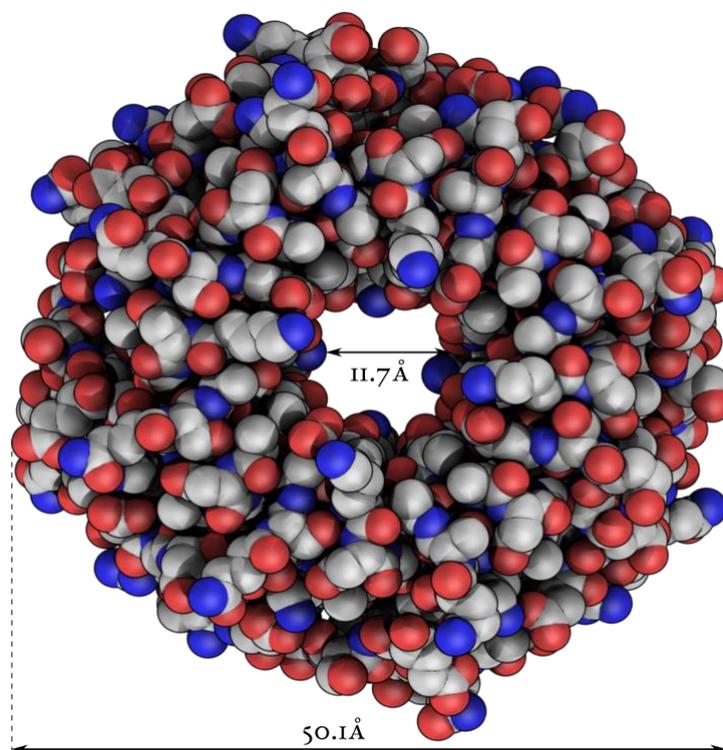
Modèle CAO de l'habitacle d'une voiture. Un algorithme de planification de trajectoires est utilisé pour vérifier, lors du processus de conception, que le siège pourra être monté/démonté. La figure montre plusieurs images extraites d'une trajectoire calculée automatiquement pour le montage avec un mécanisme de compensation de charge. Copyright Kineo-Siemens

Conception à l'échelle atomique

Les algorithmes d'IA peuvent s'appliquer à différents niveaux du processus de conception, et aussi à différentes échelles, y compris à l'échelle atomique. C'est le cas de la conception de molécules thérapeutiques. Les méthodes d'apprentissage automatique sont appliquées dans ce domaine pour chercher dans des grandes bases

de données, contenant des millions de petites molécules, celles potentiellement capables d'interagir avec une protéine cible. Ce processus, dit de criblage virtuel, est une étape clé pour le développement de nouveaux médicaments et serait inenvisageable sans l'aide de ce type d'algorithmes.

L'IA est aussi appliquée pour concevoir des protéines avec des propriétés spécifiques dans le domaine des biotechnologies. Par exemple, on peut améliorer la résistance à la température ou l'efficacité d'une enzyme (par rapport à l'enzyme naturelle) pour optimiser des processus de transformation dans l'industrie agroalimentaire. Ceci permet des économies d'énergie et parfois d'éviter le recours à des procédés chimiques potentiellement polluants. Des chercheurs du LAAS-CNRS et de l'INRAE collaborent actuellement dans ce contexte.



Un modèle atomique de la protéine symétrique 'Ika', capable de s'assembler seule dans l'eau et conçue par le logiciel ToulBar2, un outil de raisonnement automatique intégrant informations logiques et numériques éventuellement issues d'un processus d'apprentissage automatique. Ici, ce sont des lois approximatives de la physique représentées par le champ de Force "Talaris14" qui ont été exploitées (Noguchi, Hiroki, et al. "Computational design of symmetrical eight-bladed β -propeller proteins." IUCrJ 6.1 (2019): 46-55.)



Une vision simplifiée d'une protéine symétrique capable de s'assembler seule dans l'eau conçu par le logiciel ToulBar2, un outil de raisonnement automatique intégrant informations logiques et numériques, éventuellement issues d'un processus d'apprentissage automatique. Ici, ce sont des lois approximatives de la physique représentées par le champ de Force "Talaris14" qui ont été exploitées. En fond, les motifs géométriques montrent la symétrie du cristal produit pour confirmer la structure de la protéine (Noguchi, Hiroki, et al. "Computational design of symmetrical eight-bladed β -propeller proteins." IUCrJ 6.1 (2019): 46-55.)