

## Editorial

Un sujet de préoccupation actuel pour chacun d'entre nous est le dérèglement climatique qui touche l'ensemble de la planète et plus localement le réchauffement climatique dont une conséquence est le dérèglement des précipitations, entraînant des phénomènes de sécheresse qui semblent se multiplier, même sous nos climats tempérés. La disponibilité réduite des eaux de surface implique un puisage plus important dans les nappes phréatiques. Tant dans les rivières que dans les réserves souterraines la réduction de leurs volumes entraîne une augmentation de la concentration en polluants de tous types, qu'ils soient d'origine naturelle ou conséquences de l'activité humaine. La première mesure à prendre au niveau des consommateurs pour permettre aux ressources hydriques de se régénérer est évidemment une meilleure utilisation de la ressource, en optimisant l'irrigation et à titre individuel en évitant les consommations inutiles. Toutefois compte tenu du niveau inquiétant de baisse des ressources ces mesures ne seront certainement pas suffisantes pour permettre de distribuer à tous une eau de qualité irréprochable. La chimie ainsi que des opérations physico-chimiques telles que la filtration sur zéolithes et charbons actifs ou encore la nanofiltration sur membranes céramiques seront certainement une partie des solutions pour une meilleure régénération de cette ressource qui nous avait paru inépuisable mais qui s'avère limitée et fragile. C'est face à ce constat que nous avons choisi que notre dîner débat du 21 novembre soit consacré aux « Enjeux autour de l'Eau », en centrant les débats sur les questions d'approvisionnement en eau potable, incluant les qualités biologiques, et sur les traitements des effluents tant industriels que ménagers.

*Alain Thuillier, Président UNAFIC*

## Chimie et IA

Le colloque de Février 2023 de « Chimie Et... » de la Fondation de la Maison de la Chimie était consacré à l'intelligence artificielle (IA). Les conférences d'ouverture étaient délivrées par François-Xavier Coudert (ENS) et Carlo Adamo (Chimie Paris Tech). F.X. Coudert rappelle les diverses définitions des éléments de l'IA (machine learning (apprentissage automatique basé sur les données et donc d'ordre statistique sans programmation) et deep learning, partie faisant appel aux réseaux de neurones pour imiter la perception et l'intuition humaines). En chimie ces techniques peuvent conduire à la classification, la prédiction de propriétés des molécules ou la découverte de nouvelles substances. F.X. Coudert, après avoir cité AlphaFold de Google (prédisant le repliement des protéines) comme étape décisive du deep learning en 2018, décrit l'application de l'IA à la recherche de métamatériaux qu'elle permet de trouver en proportion plus importante que les méthodes traditionnelles. Carlo Adamo remplaçant le nombre de composés chimiques connus comme une part infime de l'espace des composés chimiques possibles montre l'apport de l'IA dans l'identification de composés d'intérêt, faisant remonter son application en chimie au système Dendral permettant d'identifier la structure d'un produit organique à partir de sa fragmentation en spectrométrie de masse. Conçue comme un moyen complémentaire à l'intuition humaine, l'IA a permis au MIT de découvrir un nouvel antibiotique -l'halicin- par deep learning. L'IA peut aussi être utilisée en toxicologie ou dans la sécurité. Combinée à la chimie computationnelle elle permet une accélération de la recherche en pharmacie : Laurent Schio (Sanofi) montre ainsi l'intégration actuelle de l'IA dans le design de nouveaux médicaments en utilisant les données internes ou publiques et en collaborant avec des sociétés extérieures spécialisées dans l'IA. Elle peut aussi accélérer le développement dans différents domaines comme la cosmétique intégrant des paramètres comme la peau, les émotions et l'environnement des clients. Une accélération de plans d'expériences a été démontrée par Solvay dans le cadre de son laboratoire connecté de Bordeaux. Michel Lutz de Total Energies rapporte la complexité de la compilation de données de différents types et origines et de la validation de leur qualité-problème général- pour une utilisation optimale dans l'établissement d'algorithmes. La formation à l'IA est aussi à l'ordre du jour des activités de formation continue de la société Ondalys spécialisée dans la chimiométrie puis dans le machine learning. La Majeure « Chimie&IA » à l'ECPM de Strasbourg est présentée par L. Jierry tandis que S.Bégin à l'origine de cette Majeure qui connaît sa première promotion, montre l'apport de l'IA dans le développement de matériaux théranostiques. Cédric Villani conclut cette journée en faisant un tour d'horizon sur les potentialités de l'IA dans la Chimie en confortant notamment l'approche de l'ECPM appelant donc à ajouter l'IA comme matière complémentaire à la formation des chimistes plutôt qu'enseigner la chimie à des spécialistes de l'IA.

Les vidéos des interventions des orateurs sont disponibles sur le site de la Maison de la Chimie.

*Daniel Jasserand, Vice-Président UNAFIC*

### Ecole Centrale de Marseille :

La section niçoise de Centrale Méditerranée a ouvert ses portes début mars et délivrera des diplômes de Bachelors et d'Ingénieurs.

### Relation avec les Ingénieurs et Scientifiques de France (IESF-Alsace) / Ecole Nationale Supérieure de Chimie Mulhouse

Etudiants et ingénieurs sont venus en grand nombre (85 au total) assister à cette conférence organisée par IESF-Alsace dans le cadre des JNI 2023 à l'ENSCMu le 8 mars dernier sur le sujet du Parcours à l'International des Ingénieurs. Tous les participants ont souhaité que ces rencontres très enrichissantes entre les étudiants et les ingénieurs en activité (plus de 7 intervenants de diverses Ecoles d'ingénieurs de la Région) soient renouvelées.

### Olympiades régionales de la Chimie Ile de France

A l'issue du Village de la Chimie qui s'est tenu en février à la Cité des Sciences de La Villette, a eu lieu la remise des prix des 39èmes Olympiades Régionales de la Chimie Ile de France. Les divers prix ont été remis par Mme Nathalie Liebert, Présidente du Village de la Chimie, M. Stanislas Pommeret, Président de la Société Chimique de France, et M. Christian Dubois Président des Olympiades de la Chimie en Ile de France. Pour les 3 Académies en Ile de France ce sont 274 élèves des lycées qui ont concouru, respectivement 91 pour Créteil, 97 pour Paris et 86 pour Versailles, soutenus dans leur préparation par 92 professeurs, enseignants du secondaire ou du supérieur, ingénieurs et techniciens de laboratoire.

L'étape suivante est la finale nationale ayant pour thème Chimie et Cosmétique, dont la remise des prix se déroulera le 25 mai 2023 à la Maison de la Chimie.

*Alain Thuillier, Président UNAFIC*

### Agenda

**Olympiades Nationales de la Chimie :** la remise des prix aura lieu le 25 mai à Paris ; l'Unafic y participera et remettra un prix.

**Congrès SCF :** il se tiendra 26 au 28 juin à Nantes ; inscription obligatoire (tarifs variables selon la situation)

**Dîner débat :** Le Dîner débat Unafic annuel dont le thème retenu est celui des Enjeux autour de l'Eau se tiendra à la Maison de la Chimie le 21 novembre prochain.

**Assemblée Générale :** L'Assemblée Générale de l'Unafic se tiendra le 22 juin au siège des IESF – nous sommes toujours à la recherche d'un candidat pour reprendre la Présidence de l'UNAFIC –

**Fondation de la Chimie :** Colloque "Chimie et Recyclage" 8 novembre prochain à la Maison de la Chimie  
Les colloques de la série "Chimie et ..." organisés et financés par la Fondation de la Maison de la Chimie sont d'accès gratuit pour tous les participants. Ces colloques transdisciplinaires ont pour objectifs de donner une image des sciences de la chimie plus attractive, scientifiquement exacte et honnête et expliquant les apports souvent mal connus des applications de ces sciences dans la qualité de notre vie. Ils réunissent les meilleurs spécialistes pour débattre sur ce que concepts et applications des sciences de la chimie apportent et pourront apporter. Ces colloques donnent lieu à l'édition de livres et de documents vidéo destinés un large public notamment aux jeunes afin de les intéresser à l'innovation et de les attirer vers les métiers de la R&D.