



Modélisation de Nouvelles Molécules : Au petit bonheur la chance ou avec des Modèles de Connaissances ?

La Connaissance est un Bien COMMUN, un BIEN COOPÉRACTIF.

Les Inventions sont, à terme ou directement, des BIENS COOPÉRACTIFS.

Les deux sont intrinsèquement liés. Ils sont alternativement le Moteur et le Véhicule de l'un et de l'autre. Chacun faisant progresser l'autre au cours de ses avancées.

C'est pourquoi nous devons le plus possible infuser, transférer, diffuser, mutualiser les découvertes entre ces deux champs.

Pour ceux qui voient très bien comment les Connaissances influencent les découvertes (ce qui paraît logique et cohérent, la théorie ouvre des champs pratiques) mais se demandent comment les inventions peuvent faire avancer les Connaissances, c'est parce qu'ils oublient (un peu) que l'on ne cherche que ce que l'on ne connaît pas □

Or (à mon sens) la majorité des découvertes se font sans support théorique. On fait, on manipule, on exécute et après, suivant les résultats, on élabore des théories ou des concepts.

En matière d'invention, les deux plus grandes qualités Humaines sont l'Erreur et l'Oubli !

P.AGRIPNIDIS

C'est pourquoi, devant cette prédominance du dépôt de Connaissances à partir des Inventions, il est souhaitable d'installer ou/et de renforcer l'autre flux possible, celui des Connaissances sur les Inventions.

Et c'est sur cette mise en place que les Modèles de Connaissance prennent tous leurs potentiels et importances.

L'idée force est de partir de Connaissances modélisées et structurées par un langage commun de description de caractéristiques et de relations. Sur la base de cette approche, il est alors possible de « reprendre », « dupliquer », « décalquer » la forme de cette Connaissance d'un sujet, d'un thème, d'un champ à un autre. Voire même d'infuser des Modèles de Connaissance dans le même champ

Cette méthode de transfert (sur d'autres champs ou autoportante, dans le même champ d'études) peut s'appliquer sur tout type d'invention.

Et la méthode d'autoportance de Modèles de Connaissances, d'auto réinjection s'applique notamment au cas des recherches et découvertes en matière de nouvelles molécules. Que ce soit pour des médicaments ou pour des composants



Modélisation de Nouvelles Molécules : Au petit bonheur la chance ou avec des Modèles de Connaissances ?

chimiques. En effet, quel que soit l'objectif, l'approche est la même. Proposer des structures de liaisons moléculaires et atomiques à partir de formes déjà connues. Car il n'y a pas besoin d'Intelligence Artificielle (qui est pour le moment bien souvent une boîte noire où l'on ne comprend pas et on ne sait pas ce qui se passe dans les réflexions de la machine) lorsque l'on a déjà des Savoirs structurés qui nous permettent de faire des hypothèses et des tests en toute connaissance de cause.

Ainsi, plutôt que de chercher au petit bonheur la chance de nouvelles molécules, il serait potentiellement intéressant d'utiliser des méthodes simples d'élaboration qui seraient basées sur des approches suivantes

- Combien d'[atomes](#) en moyenne sur des [molécules](#) ayant le même type d'effet recherché ?
- Combien de Molécules différentes en moyenne pour la méga moyenne ?
- Quelles sont les formes globales qui reviennent le plus ?
- Comment se « termine » les molécules ? Quels sont les « éléments » qui font office de fin de molécule, de frontière avec le reste ? Reproduire ce type de terminaison ou chercher à obtenir ce même type de terminaison a des intérêts possibles.
- Inverser des formes ou parties de molécules. Passer d'une forme convexe à concave et voir
- Symétrie. Faire les « bouts », les « fins de brins de molécules toutes identiques.
- Emboîtement. Les fins de brins se correspondent comme des Entrées et Sorties de prise électrique mâle et femelle.

Et dans le domaine cette fois-ci d'injection de Modèles de Connaissances extérieurs aux champs concernés (Biologie et Chimie), on a comme possibilité l'utilisation des :

- Théorie des Jeux dans la modalisation de l'endroit de la répartition des composants dans une molécule. Voir l'approche très intéressante [disponible ici par Alexis LAMIABLE](#).
- Théories des Belles formes géométriques en 3 dimensions [des solides de PLATON](#). Parfois des fruits pratiques se trouvent cachés dans un fatras théorique inadéquat. ([La Théorie des 4 éléments](#)). Or si l'on regarde notamment les 3 derniers solides décrits par Platon, [Octaèdre](#), [Dodécaèdre](#) et [Icosaèdre](#), en remplaçant chaque sommet par un atome ou une molécule, en collant-liant différents types de solides entre eux, on pourrait découvrir de



Modélisation de Nouvelles Molécules : Au petit bonheur la chance ou avec des Modèles de Connaissances ?

nouvelles pistes de structuration de molécules. Ou de formes de base pouvant s'agréger entre elles ou des molécules déjà existantes pour réaliser de nouvelles propositions.

- Approche artistique : Travailler une forme de molécule uniquement sur le critère, certes très subjectif et variant □ de la Beauté. Reproduire ainsi des motifs de type [mobile de CALDER](#). Ou des répétitions de formes inspirées par l'art de [VASARELY](#) (on remplace un motif de couleur par une molécule ou atome et on regarde ce que donne une construction reprenant les variations imaginées par l'Artiste). Ou de tout autre artiste inspirant permettant d'avoir une vision en 3D pouvant être reproduite, « sculptée » en matières biologique ou chimique.
- Cette liste n'est certainement pas limitative et d'autres Modèles de Connaissance venant d'autres champs d'études et de savoirs pourraient aussi être pleinement utilisés pour découvrir les nouvelles avancées

On a ainsi par un jeu volontaire et conscient (et non pas laissé à une Intelligence dite Artificielle), des pistes explorables pouvant se révéler intrinsèquement fécondes **même si on ne comprend pas**, dans un premier temps, les bases du fonctionnement pratique. En quelque sorte, la Théorie sera mise à jour par la Pratique.

À nous d'utiliser ces méthodes pour le plus grand bien du plus grand nombre possible de personnes.
