

François Dagognet et la chimie informatique*

Evan Hepler-Smith

Résumé : Dans deux livres publiés en 1969 et en 1973, le philosophe François Dagognet a mis en évidence un contraste fort entre le verbal et le visuel dans l'histoire de la représentation en chimie. Ce chapitre montre comment Dagognet décrit les noms et les formules chimiques non seulement comme des représentations et des « outils de papier », mais également comme des abstractions matérielles qui constituent en elles-mêmes des objets d'investigation. Dagognet associe cette manière de pratiquer la chimie à l'utilisation par les chimistes des ordinateurs, en se référant au travail de Jacques-Émile Dubois, dans le domaine de la chimie organique physique. Son argument tend à exagérer la rupture épistémologique liée à l'informatique dans la mesure où les éditeurs d'ouvrages chimiques comme les mathématiciens avaient traité les noms et les formules de cette manière dès la fin du XIX^e siècle. Cependant, l'attention particulière que porte Dagognet à la « chimie scripturale » a ouvert des pistes intéressantes et prometteuses de recherche historique et philosophique sur les activités scientifiques impliquant la production, la collecte et la manipulation d'un grand nombre de représentations à la fois.

Les graphes chimiques sont utilisés par des chimistes à la de composés contenant une sous-structure moléculaire spécifique, ou qui se demandent si un produit chimique est breveté, ou encore par ceux qui ont des listes de composés chimiques à tester pour de nouveaux médicaments, bref, par tout chimiste qui effectue des tâches impliquant plusieurs composés chimiques à la fois¹. Ces graphes chimiques sont des formules

* Ce chapitre est abrégé et traduit de E. Hepler-Smith, "Paper Chemistry: François Dagognet and the Chemical Graph," *Ambix* 65(1), 2018, copyright Society for the History of Alchemy and Chemistry (SHAC). L'auteur reconnaît et remercie SHAC pour la permission de publier ce chapitre. Merci beaucoup à Liv Grjebine pour son aide avec cette traduction et à Bernadette Bensaude-Vincent pour ses révisions.

¹ P. Willett, "Chemoinformatics: A History," *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* 1, 2011, p. 46–56, p. 49–50. Sur l'histoire des applications chimiques de la théorie des graphes, voir aussi A. T. Balaban, "Chemical Graph Theory and the Sherlock Holmes Principle," *Hyle* 19, 2013, p. 107–34. Sur les graphes chimiques dans la chimie actuelle, voir D. Wild, *Introducing Cheminformatics*, ed. 2.0, publié sous forme numérique, Kindle 2013.

développées – des diagrammes représentant des corps chimiques – qui présentent des recueils abstraits de rapports (liaisons chimiques) entre des unités (atomes). Ces graphes ne sont pas seulement des représentations de substances chimiques ; ils sont également des entités conceptuelles ayant des propriétés formelles propres, qui peuvent être décrites au moyen de notations diverses, adaptées à une interprétation directe et/ou au traitement automatisé. Les graphes chimiques sont des abstractions, mais ils sont également des matériaux, selon deux perspectives : ils sont considérés comme épistémologiquement pertinents et les modalités selon lesquelles les chimistes les traitent – formules développées, noms systématiques, chiffrements alphanumériques, matrices topologiques – ont un aspect concret qui permet certaines manipulations et en empêche d'autres. Si, comme Ursula Klein l'a montré, les chimistes emploient des formules comme des « outils de papier » pour mener leurs recherches théoriques et expérimentales, alors les graphes chimiques sont des *objets* d'investigation, sur le papier, sur les écrans, et sur les disques d'ordinateur².

Dans *Tableaux et langages de la chimie* (1969) puis dans *Écriture et iconographie* (1973), Dagognet présente une histoire sémiotique de la chimie qui éclaire comment les représentations chimiques sont devenues des *abstractions matérielles* de cette sorte³. Dagognet estime que l'émergence d'une chimie du futur, fondée sur l'informatique, entraînera un recul de la visualisation, remplacée par un type de représentation plus propice à la manipulation par des machines⁴. Il identifie le traitement de l'information chimique comme lieu d'une crise épistémologique qui catalyse une transformation en

² U. Klein, *Experiments, Models, Paper Tools: Cultures of Organic Chemistry in the Nineteenth Century*, Stanford University Press, 2003.

³ Sur l'analyse d'Ursula Klein et sur la catégorie d' « abstraction matérielle », la distinction entre deux sortes d'outils de papier utilisés dans les recherches ou dans la documentation chimiques, et sur le rôle des représentations chimiques dans le développement historique du domaine mathématique de la théorie des graphes, voir Hepler-Smith, « Paper Chemistry », *op. cit. supra*

⁴ On trouve une distinction parallèle chez Peter Galison entre les images "homomorphiques" et la logique "homologue": P. Galison, *Image and Logic: A Material Culture of Microphysics*, University of Chicago Press, 1997, p. 19-31.

chimie. Selon Dagognet, cette nouvelle approche de la chimie n'est rien de moins qu'une « authentique Révolution copernicienne », au cours de laquelle « la science matérielle chimique ...[est] ramenée partiellement à une science « tertiaire » d'organisation⁵. »

Dagognet ne s'attarde guère sur « la science matérielle chimique », car il s'intéresse avant tout à la représentation. Comme le souligne Bernadette Bensaude-Vincent dans le présent volume c'est l'une des raisons pour laquelle son travail a relativement peu attiré l'attention des historiens⁶. Pourtant, l'intérêt de Dagognet pour les signes, plutôt que pour les substances, fait de son travail un point de départ judicieux pour explorer une forme différente de matérialité : celle des inscriptions⁷. Selon les propos de l'historien Hallam Stevens, au sujet des processus de séquençage et d'analyse qui dominent la biologie moléculaire contemporaine, « la matérialité n'est jamais complètement effacée, mais plutôt, le matériel de l'organisme et de ses éléments est remplacé par d'autres genres de matériel : écrans d'ordinateur, électrons, mémoire flash, et ainsi de suite⁸. » Il en va de même pour les graphes chimiques. De plus, comme plusieurs historiens l'ont montré sur le cas de la géologie et du gouvernement, l'application des ordinateurs à la représentation chimique a été rendue possible par des formes existantes de représentations chimiques et les a prolongées⁹. Les ordinateurs n'ont pas transformé les formules chimiques en matières abstraites ; au contraire, les

⁵ F. Dagognet, *Écriture et iconographie*, Vrin, 1973, p. 124; F. Dagognet, *Tableaux et langages de la chimie : essai sur la représentation* [1969], Champ Vallon, 2002, p. 156 (cité ci-dessous comme *ÉI* et *TL*, respectivement).

⁶ B. Bensaude-Vincent, "Dagognet et la chimie," dans ce volume.

⁷ B. Latour, "Visualisation and Cognition: Drawing things together," in H. Kuklick & E. Long (eds.), *Knowledge and Society: Studies in the Sociology of Culture Past and Present*, 6, Jai Press, 1986, p. 1–40 (discussion de Dagognet p. 13–14).

⁸ H. Stevens, *Life out of Sequence: A Data-Driven History of Bioinformatics*, University of Chicago Press, 2013, p. 8.

⁹ D. Sepkoski, "Towards 'A Natural History of Data': Evolving Practices and Epistemologies of Data in Paleontology, 1800–2000," *Journal of the History of Biology* 46, 2013, p. 401–44; J. Agar, *The Government Machine: A Revolutionary History of the Computer*, MIT Press, 2003.

ordinateurs ont pu être utilisés pour manipuler des formules chimiques parce que ces dernières étaient déjà des matières abstraites.

La première partie de cette étude rappelle les grandes lignes de l'histoire de la sémiotique chimique selon Dagognet, en soulignant son intérêt pour la documentation chimique et l'introduction des ordinateurs en ce domaine. La seconde partie présente le système DARC de Jacques-Émile Dubois, spécialiste de chimie physique organique, cité par Dagognet comme illustration des effets révolutionnaires de l'informatique dans le champ de la chimie. La conclusion résume la conception dagognetienne de la « chimie scripturale » dont découle quelques orientations prometteuses pour la recherche historique.

La chimie comme science de l'écriture

Dagognet soutient que les objectifs de la chimie organique et ses objets de recherche ont changé entre la fin du XIX^e et le milieu du XX^e siècle. Selon lui, la chimie jusqu'ici centrée sur la recherche et la caractérisation de différentes substances, est devenue « une science d'organisation », tournée vers les traces écrites ou numériques. C'est un argument complexe et stimulant, quoiqu'il souffre de quelques insuffisances historiques manifestes. Je ne cherche ni à juger ni à confirmer l'argument de Dagognet, mais plutôt à l'explicitier et à montrer en quoi il ouvre une nouvelle perspective pour l'histoire et la philosophie de la chimie.

Dagognet s'est intéressé aux formules chimiques en tant que sujet intellectuellement fécond et historiquement important dans le cadre général d'une

philosophie de la représentation¹⁰. Comme en d'autres ouvrages, Dagognet a cherché à caractériser les ruptures épistémologiques et à expliquer le progrès de la science par-delà ces discontinuités¹¹. Dans *Tableaux et langages de la chimie*, Dagognet distingue trois modes de représentation chimique : le mot, le dessin et le tableau. Son analyse de la représentation verbale traite de « la correspondance voco-structurale » visant à établir une relation fixe et claire entre les objets chimiques, les noms et les idées. Dagognet attribue ce projet à Lavoisier, qui a appliqué à la chimie la conception condillacienne de la science comme une langue bien faite. Dagognet retrace les efforts continus des chimistes pour satisfaire cette exigence, afin que « la réalité puisse se traduire, se refléter dans une appellation transparente. » Selon lui, la chimie « picturale » émerge au moment où la représentation verbale se heurte à un obstacle épistémologique, quand « le mot échoue ». Le tableau rassemble des éléments verbaux et visuels, cherchant « non plus la traduction d'un corps, mais l'expression et l'image de tous. » Le tableau est une « photographie des familles chimiques, la carte d'ensemble des continents matériels », dépeignant « la totalité des matières, avec les qualités de chacune et la multiplicité des liens qu'elle noue avec les autres¹². » L'exemple-type du tableau, selon Dagognet, est le tableau périodique des éléments, mais il inclut aussi dans cette catégorie les répertoires de substances chimiques organiques¹³.

Dans le cas de la chimie organique structurale, Dagognet présente les représentations « voco-structurales » (dénominations chimiques ou formules condensées), écrites ou orales, comme des outils de mnémotechnique et de communication. Selon lui, ces représentations verbales se sont heurtées à l'obstacle de

¹⁰ *TL*, p. 5.

¹¹ *ÉI*, p. 123; *TL*, p. 86. Voir aussi D. Parrochia, "French philosophy of technology," in Anastasios Brenner & Jean Gayon (eds.), *French Studies in the Philosophy of Science*, Springer, 2009, p. 51–70, p. 64.

¹² *TL*, p. 6–7.

¹³ *TL*, p. 162.

l'isomérisie (des composés constitués des mêmes groupes d'atomes mais dont les propriétés diffèrent). Ce phénomène « exigeait la création d'une symbolique plus dense et aussi plus picturale » et il a, de ce fait, « imposé le passage du voco-structural au perspectif-pictural », à des formules structurales et stéréochimiques¹⁴. Toutefois, Dagognet prédit aussi « la revanche possible d'un « voco-structural » amélioré et allégé¹⁵ ». Il estime que, tout comme la représentation verbale, la chimie picturale se heurte à son tour à un obstacle épistémologique avec l'émergence de phénomènes dynamiques ou délocalisés tels que la résonance. Il en résulte « l'échec tout relatif de la figure et les embarras du géométrisme » provoquant « le recul du réalisme » : le dessin se brouille et devient abstrait¹⁶.

A la représentation verbale Dagognet reconnaît un avantage supplémentaire : contrairement aux diagrammes, les noms peuvent être rangés en ordre alphabétique. Quand il s'agit de composer des répertoires de substances chimiques – que Dagognet désigne comme « tables des matières » en jouant sur les mots – « le sonore scientifique l'emportera toujours [...] sur les formalismes graphiques¹⁷ ». C'est déterminant, selon lui, parce que les outils fondamentaux de la chimie ne sont plus des théories et des instruments mais « l'indispensable fichier, garant de l'avenir¹⁸ ». Avec un million et demi de composés chimiques organiques, en relations diverses, et des chercheurs dans le monde entier, les livres de référence conditionnent la possibilité même de pratiquer la chimie. « De nos jours, le chimiste doit surtout constituer des livres de livres. L'univers ne s'offre plus comme une carte, une mappemonde ou un texte : il se compare davantage

¹⁴ *TL*, p. 176, 179.

¹⁵ *TL*, p. 172.

¹⁶ *TL*, p. 190–94, citations p. 194.

¹⁷ *TL*, p. 161.

¹⁸ *TL*, p. 172.

à une bibliothèque infinie. Sans fichier, personne ne peut alors s'y retrouver¹⁹.» Dagonnet insiste sur la dépendance des chimistes de métier envers ces catalogues, qui évitent de fastidieuses répétitions peu professionnelles et peu efficaces²⁰. Et Dagonnet fait une analogie entre la gestion de l'information dans la chimie contemporaine et dans la gestion des affaires ou dans le gouvernement²¹.

Selon Dagonnet, ces ouvrages indispensables dépendent d'un vocabulaire commun, autrement dit de la nomenclature systématique de la chimie organique. Il montre comment le nom systématique, liant les structures chimiques aux préfixes, suffixes, et racines, peut « mettre en lumière le tréfonds de la substance ». « Bien que voué au rectiligne et à la durée, il donne l'image rayonnante du simultané, découvre des organisations spatiales complexes²². » A travers des règles de nomenclature systématique, les chimistes ont fait de la nature elle-même –des relations structurelles entre corps chimiques – le garant de l'efficacité de la communication entre chimistes. Selon Dagonnet, c'est un « moment périlleux pour le langage : il brouille deux desseins antinomiques, la convention sociale et la cohésion réelle, l'association des savants et celle des éléments²³. » Quand les chimistes ont choisi la fidélité à la structure chimique plutôt que la cohérence et la lisibilité, comme critère d'une bonne nomenclature, chaque substance a acquis « une consternante pluralité de noms », dont la plupart était « exacte mais embrouillée, sinon indicible²⁴ ». Ainsi, la documentation chimique butte à son tour

¹⁹ *TL*, p. 154–56, citation à la p. 155. C'est probablement une allusion à l'histoire de Jorge Luis Borges « La bibliothèque de Babel », dont la traduction française fut publiée en 1952.

²⁰ *TL*, p. 153–54, 194.

²¹ *TL*, p. 156.

²² *TL*, p. 158, 161.

²³ *TL*, p. 163.

sur un obstacle épistémologique. Le vaste catalogue de la chimie organique excède les limites de l'intellect humain²⁵.

Au coeur de cette rupture dans la nomenclature et la documentation, Dagognet place l'informatique.

Aujourd'hui le savant devra se dessaisir de cette tâche insurmontable et confier à un ordinateur l'inventaire du monde démesuré qu'il ne cesse pas d'élargir (les matières synthétiques). On devra passer du problème ancien de l'ordre et de l'ordination à celui de l'indispensable ordinateur²⁶.

Dagognet prédit que dans le futur, un métalangage, sous une forme informatisée, reliera automatiquement des noms systématiques à des structures chimiques²⁷. Il ne s'étend pas sur les détails de fonctionnement et on ne sait pas très bien s'il connaissait les divers projets de documentation chimique, dont les ambitions correspondaient à sa prédiction²⁸. Il a néanmoins estimé que l'informatique présageait d'un changement dans les objectifs et les objets de la pratique chimique. Il pronostique que la chimie serait « ramenée partiellement à une science « tertiaire » d'organisation²⁹ ». Son « véritable instrument [...] ne regarde plus les choses, pour ainsi dire, mais manipule et traite le savoir ou l'information³⁰. » Les futurs chimistes révolutionnaires useraient des ordinateurs « de façon non empirique, et de manière systématique ou rationnelle [...] moins pour chercher les organisations réelles que pour organiser réellement la recherche³¹ ». Selon Dagognet, la chimie fondée sur l'ordinateur viserait l'application des

²⁵ *TL*, p. 171.

²⁶ *TL*, p. 154.

²⁷ *TL*, p. 172.

²⁸ Pour un aperçu de tels projets, voir F. A. Tate, "Handling Chemical Compounds in Information Systems," *Annual Review of Information Science and Technology* 2, 1967, p. 285–309.

²⁹ *TL*, p. 156.

³⁰ *TL*, p. 154–55.

³¹ *TL*, p. 195.

connaissances expérimentales et théoriques des chimistes plutôt que l'augmentation du savoir.

Dagognet revisite le sujet de la représentation chimique dans *Écriture et iconographie*, où il applique un traitement sémiotique à une grande variété de sujets d'histoire des sciences, de l'art, de la littérature et de la philosophie. Un argument central du livre est l'idée que les méthodes et les réalisations de la science se fondent sur la transformation des modes d'inscription³² Bruno Latour rappelle que son propre développement méthodologique a été inspiré « non seulement par Derrida, mais aussi par François Dagognet, dont le petit livre, *Écriture et iconographie*, donnait au chien de chasse que j'étais la piste qu'il reniflait à pleins naseaux³³. » La chimie organique structurale et ses représentations graphiques occupent une place centrale dans cet argument ; Dagognet les décrit comme « le calvaire de l'iconicité, le problème le plus redoutable qu'elle [la fabrication des icônes] ait dû traverser³⁴ ». Ici, Dagognet vise spécifiquement « à surprendre le glissement d'une science qui s'affranchit, qui passe de l'expérimental au topographique (et aussi au typographique), d'une chimie qui se tourne en science de l'écriture³⁵ ». Poussant plus loin l'argument de *Tableaux et langages*, il entreprend de décrire comment la chimie a complètement délaissé l'expérience pour devenir une science centrée sur la création et la manipulation d'objets graphiques et textuels.

Dagognet caractérise cette réorientation de la chimie comme un basculement de « l'iconographie » à « l'iconologie ». Les sciences iconographiques présupposaient une

³² *ÉI*, p. 124.

³³ B. Latour, "Biographie d'une enquête à propos d'un livre sur les modes d'existence," *Archives de philosophie* 75, 2012, p. 549–66. Sur le soutien de Dagognet à Latour, voir H. Mialet, "Where would STS be without Latour? What would be missing?," *Social Studies of Science* 42, 2012, p. 456–61. Latour a également utilisé le travail de Dagognet dans son analyse de Pasteur: B. Latour, *Pasteur: guerre et paix des microbes* [1984], La Découverte, 2011, p. 113–117.

³⁴ *ÉI*, p. 114.

³⁵ *ÉI*, p. 113.

distinction ontologique entre l'objet représenté et l'inscription qui la représente. En revanche, l'iconologie « s'éloigne des êtres, afin de les mieux saisir, dans leur seule architecture constitutive. Il ne faut plus "redoubler" mais remplacer les espèces par leur "corps idéal". » Selon Dagognet, en passant de l'iconographie à l'iconologie, les sciences « perdent justement leur côté expérimental et relèvent de cette théorie optique *stricto sensu*, de ces graphes abstraits [...]. Elles se sont autonomisées, pour devenir sciences franchement configurationnelles, se jouer dans des constructions arachnéennes ou de savants réticulums³⁶. » Dagognet décrit de tels objets selon une modalité « abstraite-concrète », analogue à l'art non-figuratif. Comme signifiants, ils s'abstraient progressivement de la fonction de représentation mimétique, pour mettre au premier plan leur propre matérialité. L'inscription devient un objet concret « quintessencié et génératif » parce que - et dans la mesure où - elle devient plus abstraite en tant que représentation³⁷

Dagognet voit dans cette science « une sorte de chimie au troisième degré, qui fabrique des énoncés à partir d'autres énoncés, une sorte de néo-chimie textuelle et non plus empirique (les formes) ou rationnelle (les formules)³⁸, » « une mathématique des graphes et des calculs matriciels, qui permet d'en mieux appréhender la fine topologie, qui nous aide à passer d'une représentation encore trop réaliste à une plus abstraite, c'est-à-dire plus concrète.³⁹ ». Pour Dagognet, cette mathématisation topologique de la chimie ne provient pas seulement d'une évolution de l'expression formelle de la chimie

³⁶ *ÉI*, p. 112-13.

³⁷ *ÉI*, p. 12.

³⁸ *ÉI*, p. 123. Galison établit un lien similaire entre le fantasme de l'accès total à l'information et la stabilité des collectifs scientifiques hétérogènes. Cependant, Dagognet situe sa «chimie au troisième degré» en dehors de la théorie et de l'expérience, alors que pour Galison, les domaines de la «théorie de l'expérimentateur» et de la phénoménologie des théoriciens se situent entre la théorie et l'expérience; P. Galison, *Image and Logic*, *op. cit.*, p. 42-44.

³⁹ *ÉI*, p. 130.

théorique vers la topologie, ce sont les objets mêmes de la chimie qui deviennent topologiques.

Le système DARC : des abstractions incarnées

Dans *Tableaux et langages*, Dagognet associe la transformation de la chimie à l'utilisation des ordinateurs. Dans *Écriture et iconographie*, il cherche à identifier le moment où les formules structurales deviennent des graphes, des objets de recherche pour une science chimique indépendante. D'après lui, cette transformation a eu lieu dans le cadre du projet de Documentation et Automatisation des Recherches de Corrélations (DARC) du spécialiste français de chimie physique organique Jacques-Émile Dubois. Un bref examen du système DARC éclaire la relation entre les arguments sémiotiques de Dagognet et la pratique de la chimie au milieu du XX^e siècle.

Dubois, ancien membre de la résistance française, habile administrateur, et voyageur enthousiaste, polyglotte, a eu une longue et productive carrière dans la recherche et l'administration. Il a fait des contributions significatives en chimie organique physique, particulièrement dans les domaines de la cinétique rapide et de la chimie des surfaces. Il a également joué un rôle actif au sein des institutions scientifiques françaises, notamment en tant que directeur des recherches et moyens d'essais au ministère de la Défense pendant douze ans. Mais Dubois s'est surtout fait connaître par son travail en chimie informatique⁴⁰.

Dubois s'est d'abord intéressé aux abstractions matérielles pour l'analyse des données de spectroscopie ultraviolet-visible. De nombreux historiens ont montré comment la « révolution instrumentale » en chimie – c'est à dire l'adoption

⁴⁰ "Hommage à Jacques-Émile Dubois, un grand pionnier," *L'actualité chimique* 320-21, 2008, p. 7-128; Jacques-Émile Dubois, interview de Colin B. Burke, à Paris, France, le 21 janvier 2001, Chemical Heritage Foundation, Oral History Transcript #0216 (cité ci-dessous comme Dubois, Oral History).

d'instruments et méthodes physiques pour une caractérisation rapide des structures chimiques – a transformé la pratique de la chimie au milieu du XX^e siècle⁴¹. Mais ce n'est pas vraiment ce que Dagognet tente de décrire. En effet, cette révolution instrumentale a encouragé les chimistes à considérer les formules structurales comme des représentations mimétiques (même schématiques) d'unités chimiques à l'échelle nanométrique – associant ainsi un atomisme physique à leur atomisme chimique⁴². Cette tendance est en tous points opposée à celle qui intéresse Dagognet, à savoir la tendance qui éloigne de la représentation pour se rapprocher de l'abstraction. Pourtant, la révolution instrumentale joue un rôle crucial dans l'émergence des graphes chimiques en tant qu'abstractions matérielles. Elle a produit de grandes quantités de données quantitatives à associer aux formules structurales des substances chimiques et de leurs sous-structures moléculaires.

A la fin des années 1950 et au début des années 1960, Dubois essayait d'établir une corrélation entre les changements de spectre UV et les différences de structure moléculaire parmi un ensemble de composés étroitement liés, les cétones. Il fallait pour cela garder une trace de centaines de composés présentant des variations très légères de structure, puis systématiquement comparer les atomes situés à côté du groupe carbonyle qui caractérise cette classe de corps chimiques. Dubois constata que la nomenclature systématique n'était pas d'une grande aide à cette fin. Les formules condensées (les formules rationnelles de Berzelius ponctuées de parenthèses pour indiquer les ramifications) s'avéraient plus utiles, mais devenaient fastidieuses à mesure de l'élargissement de l'étude.

⁴¹ P. Morris (ed.), *From Classical to Modern Chemistry: The Instrumental Revolution*, Royal Society of Chemistry, 2002; C. Reinhardt, *Shifting and Rearranging: Physical Methods and the Transformation of Modern Chemistry*, Science History, 2006.

⁴² L. B. Slater, "Woodward, Robinson, and Strychnine: Chemical Structure and Chemists' Challenge," *Ambix* 48, 2001, p. 161–89. Sur la distinction entre l'atomisme physique et chimique, voir A. J. Roche, *Chemical Atomism in the Nineteenth Century: From Dalton to Cannizzaro*, Ohio State University Press, 1984.

Fort de son expérience avec les ordinateurs, acquise dans la supervision des essais de missiles pour le ministère de la Défense, Dubois décida de tenter une nouvelle approche de la représentation, fondée sur les matrices et les mathématiques de la théorie des graphes⁴³. Son algorithme commence avec un groupe focal, l'acétone dans le cas des corps cétoniques. Il établit le réseau des liaisons atome par atome en représentant chaque atome dans une matrice. L'addition de chaque colonne de la matrice forme un descripteur linéaire. Des codes supplémentaires associés à ce descripteur permettent de rendre compte des hétéroatomes (autres que les atomes de carbone), de la multiplicité de liaisons et des stéréo-centres. Dubois représente la formule structurale comme un *graphe*, un ensemble d'atomes et un ensemble de liens, condensé et lisible par la machine, en faisant abstraction du *graphique*, c'est à dire de la formule structurale visuellement suggestive⁴⁴.

Dubois aspirait à élargir le champ d'application du système DARC. Dans une interview rétrospective, il rappelle qu'il « a voulu commencer dans un domaine favorable et la documentation semblait être un bon point de départ⁴⁵. » En effet, le système DARC était particulièrement utile pour gérer de vastes collections de formules structurales. Il offrait un outil pour enregistrer et chercher des informations sur les corps chimiques dans les collections des organismes engagés dans le travail de documentation. Le champ de la documentation était également politiquement propice. Reprenant un argument avancé par les chimistes français depuis près d'une décennie,

⁴³ Dubois, Oral History, p. 13.

⁴⁴ J.-É. Dubois, "DARC System in Chemistry," in W. T. Wipke et al. (eds.), *Computer Representation and Manipulation of Chemical Information*, Wiley, 1974, p. 239-64.

⁴⁵ Dubois, Oral History, p. 15.

Dubois soutenait que « la France est très faible en documentation et une petite nation ne peut pas être faible partout. Nous devons être forts sur l'information⁴⁶. »

En même temps Dubois commença à utiliser les graphes chimiques du système DARC pour créer et étudier de nouveaux genres d'abstractions matérielles. Il souligne alors que ce système permet la représentation cohérente et l'étude d'un graphe chimique qui ne correspondent pas à une substance, mais à une sous-structure (une section d'une formule structurale) et même à une « hyperstructure », c'est-à-dire un ensemble de composés de structure similaire, considéré comme une seule entité chimique. Dubois se référait aux sous-structures et aux hyperstructures comme à des « nouveaux concepts [...] qui répondent aux exigences de la chimie moderne fondée sur l'ordinateur⁴⁷. » En outre, selon Dubois, en permettant aux chimistes de sélectionner différentes parties structurales comme groupe focal à partir duquel établir le graphe DARC, le programme répondait à « un des besoins essentiels du chimiste qui doit percevoir une structure sous différents angles⁴⁸ ». Dans le système DARC, c'est la "structure" (ou sous-structure, ou hyperstructure), et non la molécule, qui est objet de recherche immédiat. En effet, le système DARC a été utilisé dans la recherche de brevets, comme dans l'étude des relations entre la structure et ses propriétés et les interactions intramoléculaires, notamment dans des travaux européens relatifs à l'invention de médicaments⁴⁹.

Aux yeux de Dagognet, le système DARC réalise pleinement ses conjectures et prévisions d'évolution de la chimie formulées dans *Tableaux et langages*⁵⁰ : « Jamais

⁴⁶ Dubois, Oral History, p. 17. Sur la documentation et des normes de nomenclature comme un stratégie pour renforcer le prestige international de la chimie française, voir E. Hepler-Smith, "Nominally Rational: Systematic Nomenclature and the Structure of Organic Chemistry, 1889-1940," Ph.D. thèse, Princeton University, 2016, chapitres 1 et 6.

⁴⁷ Dubois, "DARC System in Chemistry," p. 240.

⁴⁸ Dubois, "DARC System in Chemistry," p. 248.

⁴⁹ "Chimie informatique," sur "Hommage à Jacques-Émile Dubois," p. 33-65.

⁵⁰ En passant, Dagognet a mentionné le travail parallèle de Chemical Abstracts Service; *ÉI*, p. 125.

notre thèse n'a reçu une telle confirmation, » écrit-il, et il ajoute que le système DARC « bouleverse entièrement la science moderne. » Dagognet fournit une description détaillée du fonctionnement du système, et présente les graphes DARC, ses descripteurs linéaires et des opérations telles que la corrélation des spectres UV avec les graphes des cétones comme exemplaires de son argument sur l'abstraction. Plus les représentations sont abstraites, plus elles deviennent « un « corps idéal » qu'on peut manipuler directement. » Elles permettent « un traitement informatique et automatisé des structures chimiques et de leurs capacités⁵¹ ». Le système DARC est moins un moyen de traiter des objets distincts qu'un moyen de saisir des totalités chimiques. Il est « capable de prendre appui sur des populations », et de réaliser « la science généralisée de toutes les figurations⁵² ». Dagognet considère le programme de Dubois comme un « tableau » – un analogue du tableau périodique pour la chimie organique. Selon Dagognet, l'importance croissante de la documentation dans le cadre de la chimie organique a suscité l'émergence d'une chimie fondée sur l'ordinateur. Cette nouvelle chimie qui prend les graphes chimiques – des abstractions matérielles – comme objets de recherche immédiats, constitue le point culminant de l'histoire de la représentation déployée dans *Tableaux et langages* et *Écriture et iconographie*.

Conclusion : la chimie scripturale

A l'évidence, la chimie n'est jamais devenue la science organisationnelle de « troisième degré », que décrivait Dagognet, une science tournée vers les documents, les graphes et l'écriture plutôt que vers les matériaux, les expériences et les représentations visuelles.

⁵¹ *ÉI*, p. 124.

⁵² *ÉI*, p. 128, 130.

Comme Ursula Klein et Bernadette Bensaude-Vincent l'ont souligné, en considérant la représentation comme l'essence de la chimie, Dagognet fut incapable de rendre compte des pratiques matérielles qui sont la base des industries et productions de la chimie.⁵³ De plus, comme je l'ai montré ailleurs, les graphes de la théorie mathématique des graphes ont été dès le début modélisés à partir des formules structurales des chimistes⁵⁴. La « révolution copernicienne » que Dagognet entrevoyait dans le système DARC et les systèmes comparables, fut moins une rupture dans l'histoire de la chimie, qu'un retour aux formules structurales dans l'histoire de l'informatique.

Une partie de la chimie s'est néanmoins transformée comme Dagognet l'a décrit. Aussi ses travaux peuvent-ils être lus comme une histoire philosophique de « la chimie scripturale⁵⁵. » Celle-ci inclut tout ce qui concerne l'écriture, la lecture, l'organisation et la manipulation des représentations de la structure chimique. Si les historiens et philosophes doivent « alterner entre la représentation des chimistes et des référents matériels », pour étudier les « objets de l'investigation chimique » comme Klein et Carsten Reinhardt l'ont noté, l'étude de la chimie scripturale montre que *parfois les représentations sont les référents matériels* de la recherche chimique⁵⁶. Elle englobe les champs de la documentation chimique et la chimie informatique. Elle possède ses propres pratiques, qui ne sont ni tout à fait théoriques ni tout à fait empiriques, tout en étant socialement reconnues comme relevant de la chimie. Et comme Dagognet l'a mis en évidence, la chimie scripturale est décisive pour approfondir l'étude des pratiques expérimentales et théoriques⁵⁷. Au tournant du XX^e siècle, tout spécialiste de chimie

⁵³ Klein, *Experiments, Models, Paper Tools*, p. 232; Bensaude-Vincent, "Dagognet et la chimie." dans ce volume.

⁵⁴ Hepler-Smith, "Paper Chemistry."

⁵⁵ *ÉI*, p. 130.

⁵⁶ Klein & Reinhardt, *Objects of Chemical Inquiry*, p. vii–viii.

⁵⁷ La chimie scripturale était ainsi « marginale et nécessaire », comme l'écrit Galison à propos de la technique de simulation de Monte Carlo en la physique des particules; Galison, *Image and Logic*, p. 689–780 (citation à la p. 732.)

organique utilisait le *Handbuch* de Beilstein ; aujourd'hui, un spécialiste de chimie organique pourrait difficilement se passer d'utiliser le *Chemical Abstracts Service Registry*, fût-ce indirectement⁵⁸. Les études sur la chimie scripturale devraient donc enrichir l'histoire de la chimie moderne et créer des occasions d'échanges avec les chercheurs qui étudient les relations entre lecture, écriture et expérience dans l'alchimie, au début des temps modernes⁵⁹. Elles pourraient également apporter le fil conducteur qui manque aux domaines recherches émergentes sur la « science dans les archives » et sur la généalogie historique de la science des données et de ses instruments et techniques informatiques⁶⁰.

En conclusion, trois idées de Dagognet me paraissent constituer des points de départ féconds pour la recherche philosophique et historique sur cette chimie scripturale. La première - la documentation chimique - est un domaine de pratique digne de l'attention des historiens. Les ouvrages de référence en chimie - imprimés ou sur ordinateur - sont des outils indispensables, et ils ont des histoires, des objets, des méthodes qui leur sont propres. La seconde est le concept d'« abstrait-concret » forgé par Dagognet. La matérialité des formules chimiques et de la notation (sur une page, un écran ou un disque d'ordinateur) tend à être plus évidente quand ces inscriptions représentent des référents chimiques d'une manière plus abstraite. La topographie et la typographie sont étroitement liées. La troisième - la chimie des abstractions matérielles - révèle une dimension de pluralisme méthodologique, jusque-là peu explorée dans l'histoire de la chimie. Les chimistes qui examinent les substances isolées utilisent des

⁵⁸ M. D. Gordin, "Beilstein Unbound: The Pedagogical Unraveling of a Man and his Handbuch," in D. Kaiser (ed.), *Pedagogy and the Practice of Science: Historical and Contemporary Perspectives*, MIT Press, 2005, p. 11-39; R. J. Schenck & K. R. Zapiecki, "Back to the Future: CAS and the Shape of Chemical Information To Come," in L. R. McEwen & R. E. Buntrock (eds.), *The Future of the History of Chemical Information*, Oxford University Press, 2014, p. 149-58.

⁵⁹ Par exemple, J. M. Rampling, "Transmuting sericon: Alchemy as 'practical exegesis' in Early Modern England," *Osiris* 29, 2014, p. 19-34.

⁶⁰ L. Daston (ed.), *Science in the Archives*, University of Chicago Press, 2017; E. Aronova, C. von Oertzen & D. Sepkoski (eds.), "Data Histories," *Osiris* 32, 2017.

formules comme des outils de papier. Les scientifiques qui souhaitent apprendre quelque chose à propos des larges collections de substances chimiques – des centaines de corps cétoniques légèrement différents dans le cas de Dubois – se sont détournés des substances et des théories chimiques et se sont tournés vers des abstractions matérielles. Selon cette interprétation, le tableau de Dagognet – « la totalité des matières, avec les qualités de chacun et la multiplicité des liens qu'elle noue avec les autres » – n'est pas la fantaisie bourgeoise d'une bibliothèque infinie ou d'une carte grandeur nature du monde chimique. Il s'agit d'une autre manière de connaître les corps chimiques, au niveau d'une multitude de produits chimiques plutôt que d'une seule. Dans chacune de ces interprétations, pour une minorité significative de chimistes depuis la fin du XIX^e siècle « il suffit, en quelque sorte, d'écrire, de mieux écrire, pour savoir⁶¹. »

⁶¹ *ÉI*, p. 130.