

## OFFRE DE THESE

### **Modélisation avancée de l'inflammabilité des mélanges : intégration de bases de données structurées, modèles physicochimiques et intelligence artificielle**

**Date de publication :** 31/03/2026

**Lieu :** Verneuil-en-Halatte (60) - accessible en transports en commun, à 40 mn au Nord de Paris

**Type de contrat :** Thèse

**Contact :** [guillaume.fayet@ineris.fr](mailto:guillaume.fayet@ineris.fr)

L'évaluation de l'inflammabilité et de l'explosivité des substances et des mélanges constitue un enjeu majeur pour la sécurité des procédés, l'analyse des risques industriels et leur classement dans les réglementations telles que le règlement européen CLP ou le transport de marchandises dangereuses (TMD).

Or, les propriétés clés de l'évaluation de ces dangers, point d'éclair (FP), limites d'inflammabilité (LIE/LSE) et température d'auto-inflammation (TAI), dépendent fortement de la composition, des interactions entre constituants et des conditions expérimentales et les comportements observés peuvent être très complexes pour certains mélanges (non-idéalité, non linéarité, effets synergiques ou antagonistes) représentant un défi pour leur anticipation.

Face à ces limites, les méthodes prédictives modernes (QSPR/QSAR, modèles thermodynamiques avancés, approches hybrides et intelligence artificielle) offrent un potentiel important mais encore largement sous exploré pour les mélanges. Les travaux récents conduits à l'Ineris ont montré que la performance de ces modèles dépend moins des algorithmes que de la qualité, de la diversité chimique et de la structuration des bases de données disponibles.

Les jeux de données expérimentales disponibles, trop restreints, ne permettent pas de démontrer pleinement l'apport des techniques de machine learning. En effet, les données collectées présentent une forte hétérogénéité (méthodes, appareils, critères expérimentaux, pureté, métadonnées manquantes), limitant la quantité de données robustes pour développer et valider des approches prédictives. De plus, elles ne sont pas suffisamment distribuées en termes de comportements physico-chimiques pour prendre en compte correctement les comportements les plus complexes rencontrés.

L'objectif de cette thèse est de surmonter ces limites en explorant de nouvelles voies de constitution / structuration de bases de données exploitables, de développer un cadre méthodologique robuste pour la prédiction de l'inflammabilité des mélanges, reposant simultanément sur trois piliers :

1. La consolidation de bases de données expérimentales riches, structurées et accompagnées de métadonnées complètes, provenant à la fois de la littérature et des données internes de l'Ineris. Le potentiel d'outils de moissonnage et d'extraction automatisé de données à l'aide de l'IA sera exploré ;

2. la génération de bases virtuelles représentatives, construites avec des modèles phénoménologiques et thermodynamiques afin de disposer d'un échantillonnage de mélanges suffisamment diversifié pour que le modèle soit adapté aux différents comportements attendus dans des mélanges industriels ;
3. le développement de modèles basés sur des approches d'intelligence artificielle et des approches hybrides intégrant des contraintes physicochimiques maîtrisées. Les modèles seront évalués selon les bonnes pratiques de validation réglementaire adaptées au cas des mélanges.

Les résultats attendus incluent une base de données de référence, de nouveaux outils prédictifs opérationnels, ainsi qu'un ensemble de recommandations facilitant l'intégration de ces approches dans les pratiques de l'Institut en complément des essais menés à l'Ineris.

Cette thèse sera menée au sein de la Direction IDE (Incendie Dispersion Explosion) sur le site Ineris de Verneuil-en-Halatte en collaboration avec le laboratoire iCLEHS de Chimie ParisTech, au sein duquel quelques séjours ponctuels sont à prévoir.

## MOTS-CLES

Inflammabilité ; explosivité ; mélanges ; prédiction ; QSPR ; intelligence artificielle

## PROFIL

- Ecole d'ingénieur ou Master 2
- Chimie, Génie Chimique, Génie des Procédés, Sécurité des Procédés ou Data Sciences
- Connaissances sur les propriétés dangereuses des substances et la sécurité des procédés
- Connaissances en programmation et Data science avec intérêt manifeste pour la modélisation numérique
- Autonomie, rigueur scientifique et capacité de communication pour faire le lien entre équipes modélisation et expérimentales
- Bonnes qualités rédactionnelles et orales requises (en français et anglais).

**Ce poste est ouvert aux personnes en situation de handicap.**