

OFFRE DE STAGE

Intelligence artificielle pour le prédiction des dangers physiques de mélanges

Date de publication : 16/11/2023

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

Type de contrat : stage

Contact : guillaume.fayet@ineris.fr - Tél. : 03 44 61 81 26

patricia.rotureau@ineris.fr

Les dangers physiques de mélanges de substances chimiques, associés aux risques d'incendie ou d'explosion par exemple, sont en général caractérisés à l'aide d'outils expérimentaux. Ces essais peuvent être coûteux, complexes, longs à réaliser voire dangereux pour l'opérateur. Aussi, depuis plusieurs années et notamment avec la mise en application du règlement REACH, des méthodes prédictives de type QSAR/QSPR (pour relations quantitatives structure-activité/propriété) sont encouragées et utilisées comme alternatives rapides et économiques aux essais pour déterminer les dangers (éco)toxicologiques mais également physiques de substances chimiques¹.

Si cette approche ainsi que ses principes de développement et de validation ont été prévus pour des modèles prédictifs des propriétés de produits purs, son application aux mélanges connaît un essor certain ces dernières années^{2,3}, malgré les nombreux défis scientifiques et méthodologiques, additionnels à ceux de la prédiction des propriétés de produits purs. L'Ineris a notamment développés de premiers modèles QSPR pour la prédiction des points d'éclairs de mélanges liquides inflammables⁴.

Si les travaux existants permettent d'ores et déjà de compléter l'approche expérimentale, l'objectif de ce stage est le développement de nouveaux modèles QSPR plus performants et pour d'autres propriétés que le point d'éclair, (en particulier, la température d'auto-inflammation) et d'explorer le potentiel des méthodes utilisées dans le domaine de l'intelligence artificielle (réseaux de neurones, support vector machine, k-NN...). Les modèles existants sont jusque-là majoritairement basés sur des régressions multilinéaires mais de telles approches non linéaires, plus complexes, peuvent être intéressantes pour prendre en compte la complexité des mélanges.

¹ G. Fayet, P. Rotureau, Mol. Inform. 2022, 41, 2000190

² E.N. Muratov, E.V. Varlamova, A.G. Artemenko, P.G. Polishchuk, V.E. Kuz'min, Mol. Inform. 2012, 31, 202-221

³ S.J. Belfield, J.W. Firman, S.J. Enoch, J.C. Madden, K. Erik Tollefsen, M.T.D. Cronin, Comput. Tox. 2023, 25, 100251

⁴ G. Fayet, P. Rotureau, Mol. Inform., 38, 2019, 1800122.

Dans un premier temps, une collecte des données expérimentales disponibles sur les dangers physiques de mélanges, dans la littérature et les études Ineris, sera réalisée afin de consolider une base de données de référence sur les dangers physiques des mélanges. Une étude bibliographique sur les nouvelles approches exploitables (réseaux de neurones, support vector machine, k-NN...) sera menée en parallèle pour mettre en place une approche méthodologique pertinente. Des modèles seront ensuite développés sur la base de cette approche pour le point d'éclair (pour identifier les gains apportés par ces approches par rapport à la méthodologie Ineris existante (basée sur des régressions multilinéaire) puis sur une autre propriété physico-chimique dangereuse, la température d'auto-inflammation.

PROFIL

Bac +4/5 - chimie théorique, modélisation moléculaire, machine learning

DIVERS

Durée : 4/6 mois

Ce poste est ouvert aux personnes en situation de handicap.