

L'intelligence artificielle pour guider l'écoconception de produits chimiques et anticiper l'impact environnemental de leurs cycles de vie

Voulez-vous mettre vos compétences en informatique et en intelligence artificielle au service de l'environnement? Souhaitez-vous créer de nouveaux outils et méthodes d'analyse agiles pour appuyer une écoconception de produits chimiques, en partenariat avec un acteur industriel de premier plan? Que diriez-vous de contribuer à rehausser le niveau d'exactitude et de précision des évaluations d'impacts environnementaux?

Si oui, ce doctorat est pour vous!

Le défi de recherche :

La conception de nouveaux produits chimiques véritablement «verts» exige qu'on prenne en compte non seulement les caractéristiques de ces produits (biodégradabilité, toxicité, etc.), mais également les impacts environnementaux causés indirectement lors de leur production, leur usage et leur traitement de fin de vie. Présentement, obtenir une telle perspective de cycle de vie est un processus long et couteux. Appliquer des analyses de cycle de vie (LCA) traditionnelles à des centaines d'options de conception est tout simplement impraticable. Ce projet de recherche vise donc à utiliser l'intelligence artificielle (IA) pour estimer rapidement les données manquantes des LCAs prospectives de produits chimiques en se basant sur leurs propriétés et celles de leurs procédés de production.

Contexte industriel :

TotalÉnergies vise à devenir une entreprise «Net Zero Emissions» d'ici 2050. Pour appuyer ces efforts, une nouvelle équipe de recherche et développement en écoconception a été mise sur pied. Celle-ci vise à favoriser le développement de gammes de produits écoresponsables, notamment une nouvelle génération de lubrifiants. Ce projet vise à créer un nouvel outil libre (*open-source*) pour appuyer les efforts de cette équipe et estimer les données manquantes dans l'estimation prospective d'impacts environnementaux ainsi que leurs incertitudes. Ces modèles prédictifs (tri *in silico* et conception *in silico de novo*) vont permettre aux chercheurs et concepteurs de se concentrer sur les formulations les plus aptes à minimiser les impacts environnementaux, tout spécialement ceux ciblés par la méthodologie Européenne PEF.

Contexte académique :

Ce doctorat est entièrement financé et sera basé au Département de génie chimique de Polytechnique Montréal, une école de génie de premier rang et un leader dans la modélisation numérique. Vous vous joindrez aussi au CIRAIG, un centre de recherche dynamique avec une équipe multidisciplinaire dédiée à l'amélioration des mesures de la durabilité et l'optimisation environnementale de systèmes de production et de consommation. Le CIRAIG est reconnu internationalement pour la rigueur de sa recherche et pour son expérience appliquée avec des partenaires industriels et gouvernementaux. Nous visons l'excellence académique dans un milieu dynamique et une communauté qui prise le respect, la collégialité et la liberté académique.

Profils de candidat.e.s

Nous cherchons un candidat ou une candidate avec une solide formation en génie, en sciences informatiques, ou en sciences naturelles. Des compétences en programmation scientifique, en modélisation ou en IA seraient d'importants atouts. Nous cherchons quelqu'un avec un vif intérêt pour les questions de développement durable, quoiqu'une formation préalable en écoconception ou en LCA ne soit pas requise.

Équité, diversité et inclusion

Nous encourageons les candidatures venant de personnes racisées, de minorités visibles ou ethniques, de femmes, de personnes autochtones, de personnes avec un handicap, de personnes appartenant à une minorité sexuelle ou de genre, ainsi que de toute personne avec les compétences et le désir de s'intégrer à une communauté de recherche diversifiée.

Mots clés

Analyse de cycle de vie (LCA), Écoconception, Gestion de données, Intelligence artificielle, Modèles prédictifs, Apprentissage machine, Chimie verte

Quand

4 ans, idéalement dès janvier 2023

Langue

- Anglais
- Français (optionnel)

Prise de contact

Veillez envoyer votre CV, une lettre de motivation, vos diplômes et relevés de notes à :

Guillaume Majeau-Bettez, Polytechnique Montréal (guillaume.majeau-bettez@polymtl.ca)

Bruno Blais, Polytechnique Montréal (bruno.blais@polymtl.ca)

Marion Courtiade, TotalEnergies (Marion.courtiade@totalenergies.com)

Arvind Latchou, TotalEnergies (Arvind.latchou@totalenergies.com)

François Saunier, CIRAIG (francois.saunier@polymtl.ca)

Bibliographie

SONG Runsheng, KELLER Arturo, SUH Sangwon. Rapid Life-Cycle Impact Screening Using Artificial Neural Networks. Environmental Science & Technology. 2017

MENG Qiang, LI Fang-yi, ZHOU Li-rong, Li Jing, JI Qin-qin, YANG Xiaodong. A rapid Life Cycle Assessment Method based on Green Features in Supporting Conceptual Design. International journal of precision engineering and manufacturing green technology Vol. 2, No. 2, pp. 189-196

HOU Ping, JOLLIET Olivier, ZHU Ji, XU Ming. Estimate ecotoxicity characterization factors for chemicals in life cycle assessment using machine learning models. ELSEVIER Environmental International. 2020