

# BioPlast'IA

Développement d'une alternative durable au  
plastique proposée par une IA  
Conception et validation technique



## 1. Contexte et objectif général du projet BioPlast'IA

Depuis 75 ans, les plastiques ont envahi notre quotidien à tel point qu'un septième continent s'est formé dans le pacifique dont la superficie dépasse 3 fois celle de la France[1]. L'un des plastiques les plus utilisés est le polychlorure de vinyle (PVC). Il est utilisé pour faire des conduits, des emballages, des revêtements et bien d'autres objets. Chaque année 50 millions de tonnes de PVC sont produits dans le monde et ce chiffre ne cesse de croître[2]. Cela représente 4950 fois le poids de la Tour Eiffel. Si chaque habitant consommait du PVC de manière homogène, nous consommerions chaque année 6,25 kilos chacun. Aujourd'hui, de nombreuses investigations industrielles et académiques sont menées pour produire des polymères biosourcés et recyclables. Cependant, l'impact écologique de la production, du transport, de l'utilisation des matériaux polymères ne concerne pas seulement le polymère en lui-même. En effet, un matériau polymère contient beaucoup d'autres composés qui entrent dans sa formulation et dont l'impact pour l'environnement est tout aussi préoccupant.

En effet, le PVC (ou des "PVC-like" biosourcés) peut contenir entre 10 et 40% de plastifiants selon les propriétés physiques désirées du matériau. Ils permettent d'obtenir des plastiques flexibles et résistants. Ces plastifiants, comme les phtalates, sont hautement toxiques et sont reconnus pour être des perturbateurs endocriniens. Ils interfèrent avec les hormones du corps et impactent la fertilité, ils créent des problèmes respiratoires et augmentent le risque de troubles comme l'autisme.

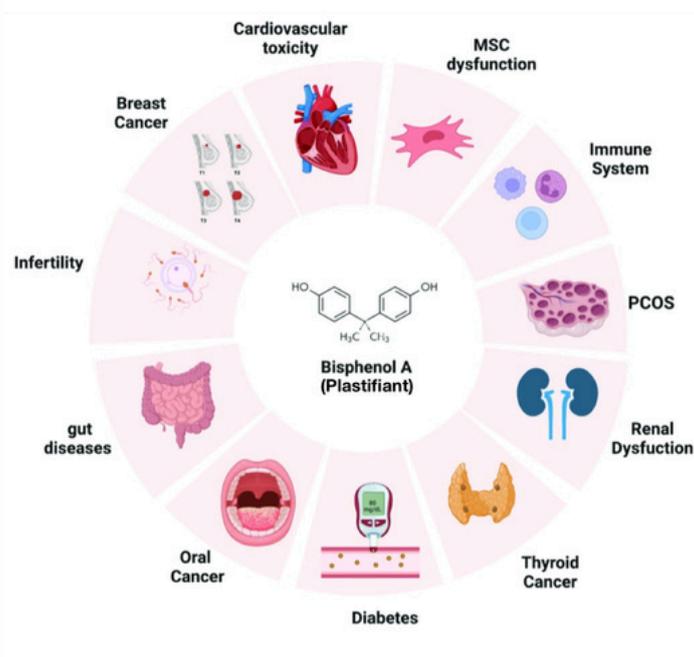


Figure 1 : <https://encyclopedia.pub/entry/42498>

Ces plastifiants se diffusent et peuvent notamment se concentrer dans nos milieux aquatiques dans des algues ou poissons qui se retrouvent in fine dans la chaîne alimentaire. La Figure 1 ci-dessous illustre les impacts sur l'environnement les plus importants de l'utilisation d'un autre plastifiant, le bisphénol-A REF.

La prise de conscience de l'impact des plastifiants a permis la mise en place de restrictions visant à réduire l'exposition à ces plastifiants mais cela reste encore insuffisant au vu de leur dangerosité. A l'heure actuelle, il existe des alternatives pour remplacer ces plastifiants mais elles présentent d'autres limites comme le caractère non-durable de l'approvisionnement en matières premières pour les synthétiser, des propriétés physiques non totalement satisfaisantes pour le matériau polymère résultant et un impact environnemental encore trop important: en effet, certains plastifiants biosourcés, en dépit de leur nom paraissant plus durable, sont impactants pour l'environnement et non durables, lorsqu'il s'agit par exemple d'huile entraînant déforestation et surexploitation.

L'objectif du projet BioPlast'IA consiste en la conception d'une intelligence artificielle (IA) pouvant permettre de proposer un composé alternatif durable à chaque plastifiant, en conservant les propriétés mécaniques visées et à un coût raisonnable pour la production du matériau polymère. Une validation technique de cet outil constitue le second volet de ce projet qui prévoit la production d'un nouveau PVC contenant un "bioplastifiant" et l'évaluation de ses caractéristiques mécaniques.

# »»» Nos atouts pour la réalisation de ce projet

## L'équipe BioPlast'IA



## 2. Qui sommes-nous ?

Notre équipe est composée de huit élèves ingénieurs en première année de la Majeure Chimie&IA de l'ECPM: la proportion de genre de notre groupe reflète quasiment celle de notre promotion au sein de la Majeure. Nous nous sentons qualifiés pour relever le challenge que représente notre projet BioPlast'IA pour les raisons suivantes : (i) notre formation à l'ECPM nous confère des connaissances solides en sciences chimiques, en ingénierie des polymères et en procédés de fabrication. D'autre part, (ii) notre intégration dans la nouvelle Majeure Chimie&IA de l'école, nous permet d'acquérir une expertise en gestion de bases de données chimiques, en sciences des données et modèles prédictifs de l'apprentissage automatique (programme première année). Cette double compétence nous permet de proposer une équipe composée de membres d'une seule et même école.

L'IA, que nous proposons de concevoir pour le projet BioPlast'IA, est un maillon essentiel de notre projet car elle doit nous permettre d'explorer efficacement un vaste ensemble de molécules potentielles pour trouver des plastifiants biosourcés adéquats. Cette tâche serait extrêmement longue et coûteuse en utilisant les méthodes conventionnelles d'essais et d'erreurs à la disposition de l'ingénieur. Grâce à sa capacité à prédire les propriétés des molécules, notre IA doit nous guider vers des candidats prometteurs à évaluer, accélérant ainsi notre recherche de plastifiants biosourcés sûrs et performants. Pour ce faire, nous avons contacté, puis échangé, avec l'entreprise franco-canadienne, Mayfair Village, expert en solution d'IA pour la chimie. En effet, cette entreprise est à l'origine du développement de l'outil numérique Chemy Lane capable d'analyser rapidement la littérature scientifique existante, et en extraire de grandes quantités de données, optimisant ainsi les phases de conception de notre IA. Enfin, l'Université de Strasbourg, dont l'ECPM fait partie, complète ces ressources en nous offrant une puissance de calcul significative pour nos simulations et analyses de données.

Cependant, si cette IA est essentielle à la réalisation de notre projet, elle n'est pas suffisante car un second volet du projet BioPlast'IA est dédié à la validation expérimentale. Pour ce faire, nous bénéficions de ressources technologiques avancées, notamment une salle équipée de trois extrudeuses monovis, une presse à injecter et un banc de tirage pour tester nos matériaux.

Ces outils et compétences, combinés à notre approche innovante basée sur l'IA nous positionnent idéalement pour mettre en œuvre notre solution au niveau technique, afin d'atteindre notre objectif : développer une alternative durable et performante aux plastifiants toxiques utilisés, exemplifié dans le cadre de la production de PVC.

# Le projet BioPlast'IA

## 3. Conception de l'IA nécessaire au projet BioPlast'IA

Avant de pouvoir formuler ce nouveau plastique, nous devons trouver le plastifiant. Pour cela, nous pourrions utiliser comme réseau de neurones profond (deep learning), un modèle de régression logistique comme un modèle Transformers[3] qui permettrait d'associer des labels ('plastifiante' et 'non plastifiante') à des molécules. L'ensemble des sept étapes (1) - (7) qui doivent nous permettre de concevoir notre IA est représenté sur la Figure 2. Tout d'abord, nous utiliserons l'outil Chemy Lane afin d'obtenir (1) une base de données de ces différents plastifiants issus de la littérature scientifique. Nous pourrions utiliser la représentation fingerprint de Morgan pour enregistrer les molécules dans les bases de données. Dans un premier temps (2), nous allons entraîner notre IA à reconnaître les molécules dites plastifiantes. Ensuite (3), nous utiliserons PubChem pour vérifier si notre IA est bien fonctionnelle. Cette seconde base de données (4) sera constituée de molécules plastifiantes mais aussi de molécules avec des structures et des fonctions semblables mais non plastifiantes. Nous pourrions ainsi vérifier la validité de notre modèle à l'aide de métriques comme l'exactitude, la précision, la sensibilité, la spécificité ou le score F1. Comme indiqué sur la Figure 2, lorsque les métriques seront optimales, nous pourrions passer à la base de données Coconut (5), une base de molécules biosourcée, pour déterminer (6) dans cette dernière base de données les molécules d'origine naturelle et plastifiante (7). Enfin, nous pourrions tester ces nouveaux potentiels plastifiants en laboratoire pour voir s'ils sont réellement efficaces.

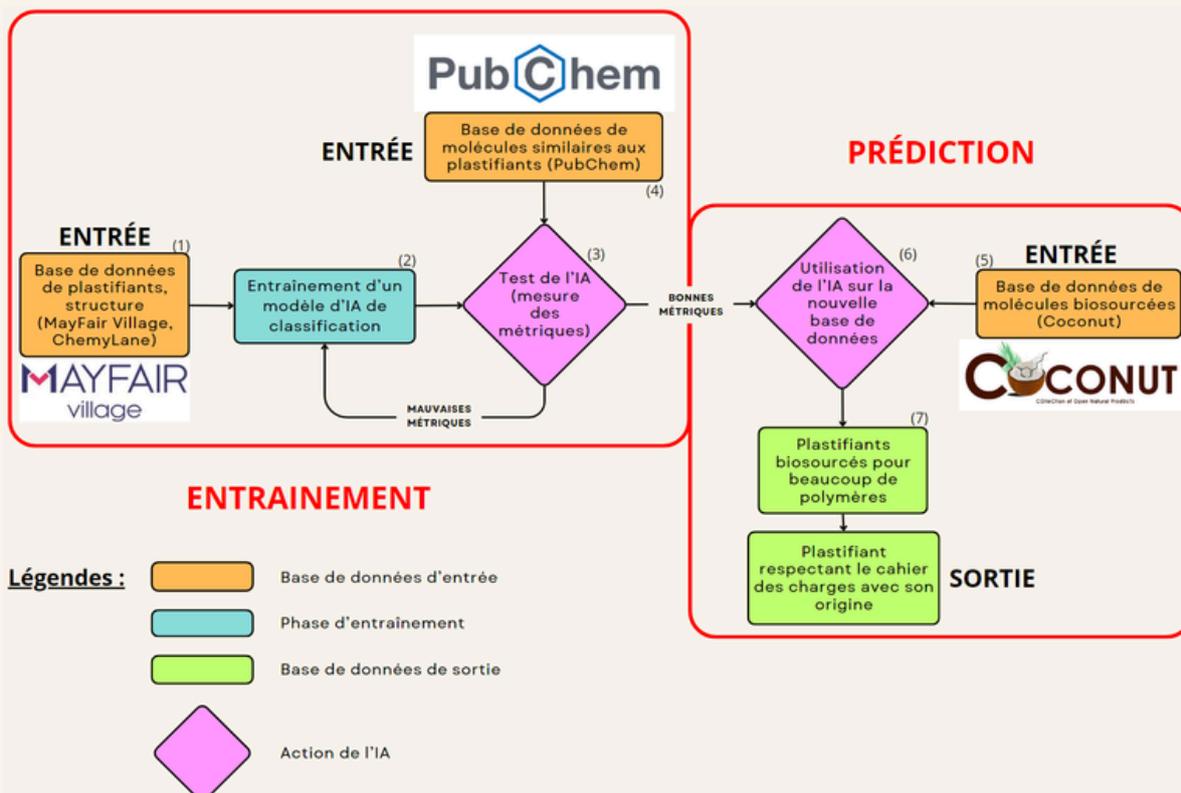
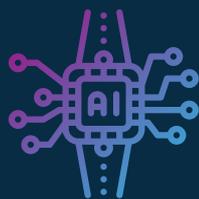
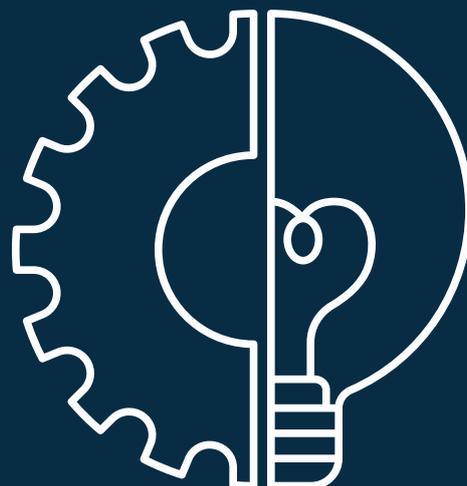


Figure 2 : Schéma d'entraînement et de prédiction de notre intelligence artificielle

Il sera également possible de prendre en considération l'origine végétale, animale, bactérienne, etc. de nos molécules grâce à la fiche disponible dans la base de données Coconut. Une recherche plus fine pourra, dans le futur, prendre en compte l'origine géographique et ainsi calculer un impact carbone.

Les potentielles voies d'amélioration sont notamment d'associer un score de plastification aux fragments de la molécule. Ce score serait basé sur le module d'Young des plastiques formés et sur d'autres grandeurs physiques mais aussi par rapport à l'analogie de structure entre les différents plastifiants. Ce score permettra ainsi de détecter dans la base de données de molécules biosourcées, les molécules compatibles avec notre cahier des charges.



# Plan de travail

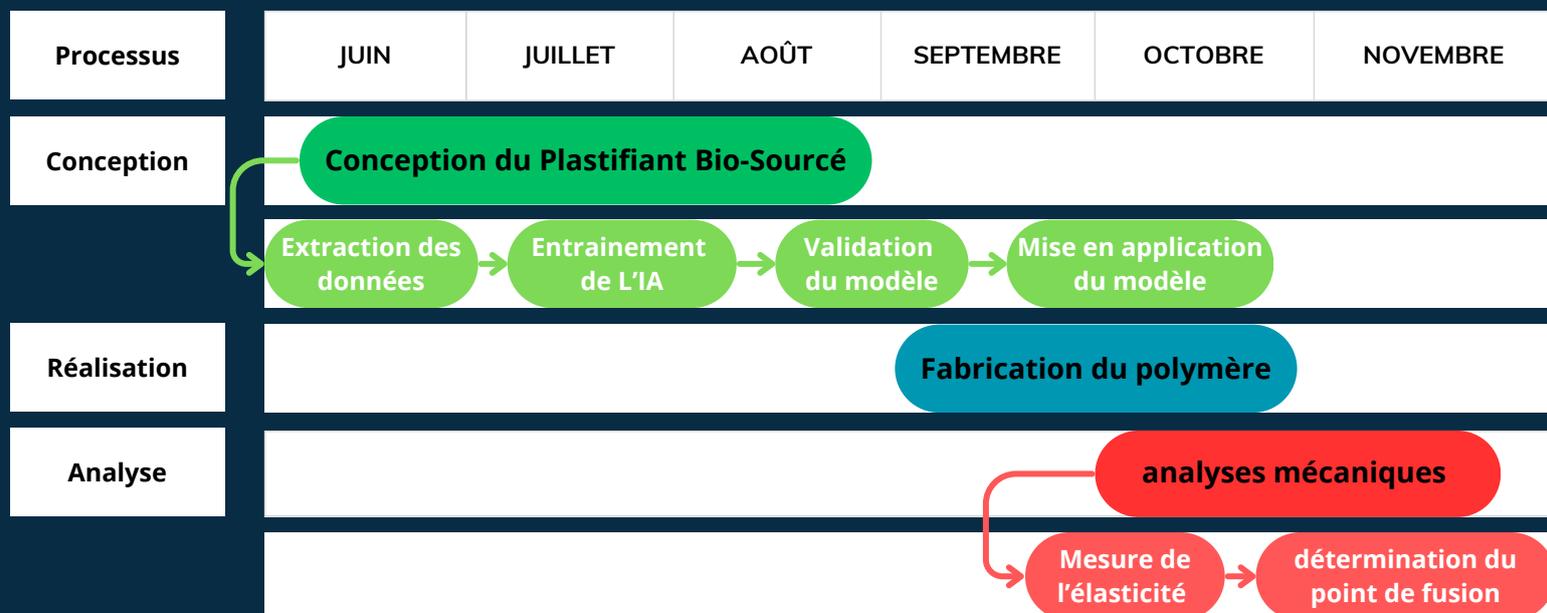
## 4. Diagramme de Gantt et déroulement projet BioPlast'IA

Notre projet BioPlast'IA s'étend sur une période de 6 mois et comprend trois tâches principales divisées en sous-tâches telles que représentées et décrites dans la Figure 3 ci-dessous.

### POINTS CLÉS DU PROJET

Obtention d'une IA → Création de Bioplastifiant → Fabrication d'un plastique biosourcé

### DIAGRAMME DE GANTT



# ➤➤➤ Critères de réussite

## 5. Critères de réussite du projet BioPlast'IA

Nous sommes conscients des limitations des modèles d'IA, ceux-ci ne sont pas parfaits et commettent des biais et des erreurs potentielles. Toutefois, nous essayons de les utiliser au mieux en tenant compte de ces contraintes.

**Validation numérique :** Tout d'abord, il est important de trouver des moyens de confirmer que l'outil d'intelligence artificielle que l'on a développé fonctionne correctement.

Le modèle de classification des molécules en plastifiants ou non plastifiants doit prouver des performances efficaces à travers plusieurs métriques :

- La précision, qui détermine le pourcentage de molécules réellement plastifiantes parmi toutes celles qui ont été classées plastifiantes. Plus elle se rapproche de 100%, plus le modèle prédit correctement.
- Le rappel ("recall") qui lui permet de savoir la proportion de molécules plastifiantes qui ont été classées "Plastifiantes" par le modèle. Là encore, plus l'on se rapproche de 100%, plus le modèle est efficace.

Pour ces deux métriques, il est important de viser la valeur la plus haute possible (qui varie selon les modèles et des données) afin que le modèle soit optimisé.[4]

- Le F-score, qui combine la précision et le rappel pour évaluer l'exactitude globale, en visant des valeurs proches de 1 pour indiquer une performance élevée.[5]

Ces métriques peuvent nous aider à déterminer si le modèle n'est pas en situation de sur apprentissage des données, ou à améliorer le modèle en trouvant les meilleurs paramètres et obtenir de meilleurs résultats.

Une fois l'entraînement réalisé, l'outil doit être en capacité de trouver un plastifiant biosourcé correspondant au plastifiant pétrosourcé que l'on veut remplacer, mais l'objectif est d'en trouver plusieurs, afin de pouvoir les comparer entre eux et sélectionner celui qui correspond le plus.

**Validation technique :** Dans un second temps, nous devons vérifier que le polymère conçu avec la molécule biosourcée correspond à nos attentes quant à ses propriétés. En effet, nous souhaitons que celui-ci soit une vraie alternative à un polymère pétrosourcé. Après avoir conçu ce polymère alternatif, nous serons en mesure de mener des expériences qui permettent de déterminer des propriétés telles que l'élasticité, la mesure du point de fusion, l'allongement à la rupture, etc. Celles-ci seront à comparer avec celles du polymère pétrosourcé que l'on pourra mesurer ou trouver dans la littérature.



## Sources :

[1] <https://youmatter.world/fr/categorie-environnement/les-coupables-7eme-continent-plastique/>

[2] [https://plasticseurope.org/de/wp-content/uploads/sites/3/2023/11/PlasticsthefastFacts2023\\_printing.pdf](https://plasticseurope.org/de/wp-content/uploads/sites/3/2023/11/PlasticsthefastFacts2023_printing.pdf)

[3] M. Glauet, F. Neuhaus, S. Fluügel, M. Wosny, T. Mossakowski, A. Memariani, J. Schwerdt, J. Hastings, Chebifier : automating semantic classification in ChEBI to accelerate data-Driven discovery, Digital Discovery, 2024, 3, 896-907

[4] <https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/classification/precision-and-recall?hl=fr>

[5] <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC8993826/>