

ECOLE CENTRALE DE LILLE
G3 – DAD

Traitement de données pour le criblage catalytique haut débit

This project will be supervised by:

Pr Sébastien Paul	UCCS UMR CNRS 8181 Ecole Centrale de Lille
Pr Emmanuel Duflos	LAGIS UMR CNRS 8219 and SEQUEL research team INRIA Ecole Centrale de Lille
Pr Philippe Vanheeghe ¹	LAGIS UMR CNRS 8219 and SEQUEL research team INRIA Ecole Centrale de Lille

¹ Corresponding author

Contexte du projet

Ce projet se place dans la cadre de l'Equipex REALCAT (plateforme intégREe AppLiquée au criblage haut débit de CATalyseurs pour les bioraffineries). Il a pour "objectif principal la mise en place d'une plate-forme hautement intégrée consacrée à l'accélération de l'innovation dans tous les domaines de la catalyse industrielle avec une spécificité en procédés de bioraffinage catalytiques" (extrait du dossier Equipex). Cette plateforme pilotée par l'Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS UMR CNRS 8181) est localisée à l'Ecole Centrale de Lille sera complètement opérationnelle au début de l'année 2014.

Le criblage catalytique haut débit

Le criblage catalytique consiste en l'exploration systématique de bibliothèques d'échantillons de catalyseurs qu'il faut synthétiser, analyser et tester pour une réaction donnée. Le criblage catalytique haut débit tire profit de la parallélisation et de l'automatisation des traitements liés à ces opérations. La mise en place de la plateforme REALCAT nécessite la mise en œuvre d'équipements dédiés mais aussi de logiciels indispensables pour le pilotage et la surveillance des matériels, la génération de plan d'expérience et pour le traitement des grandes quantités de données générées par les expériences.

Le projet

C'est sur le dernier point du paragraphe précédent que porte le projet, sachant que l'équipement REALCAT va potentiellement générer des Teraoctets de données. L'objectif est la définition de traitement pour analyser les données pour déterminer des conditions opératoires optimales (température, pression, ...). Un autre aspect concerne l'élaboration de plan d'expériences.

Ce projet propose une étude préliminaire des données et traitements permettant d'atteindre l'objectif précédent.

- a) analyse des données produites par la plateforme;
- b) sur la base d'une analyse bibliographique faire un panorama des méthodes potentiellement utilisable. Un ensemble de références seront fournies pour débiter le travail;
- c) test élémentaires des méthodes envisagées en simulation.