

Traitement de données pour le criblage catalytique haut débit

Encadrement : Sébastien Paul, Philippe Vanheeghe.

Contexte du projet

Ce projet se place dans le cadre de l'Equipex [REALCAT](#) (plateforme intégREe AppLiquée au criblage haut débit de CATalyseurs pour les bioraffineries).



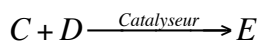
Cette plateforme permet la synthèse de systèmes catalytiques ainsi que leur test de performances en réaction et leur caractérisation à haut débit sur des robots. L'ensemble de cette chaîne de développement (synthèse, caractérisation et test) est rassemblé sur un même site, ce qui fait que cet équipement est un outil unique. Cette plateforme pilotée par l'Unité de Catalyse et Chimie du Solide ([UCCS UMR 8181](#)) est localisée à l'Ecole Centrale de Lille.

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

Le projet concerne plus particulièrement la phase de test catalytique durant laquelle on cherche à optimiser les performances d'un catalyseur donné fabriqué dans une phase précédente du processus. Pour effectuer ces tests on se place dans le cas d'une réaction donnée, ceci peut être schématisé de la manière suivante :



C et D sont les réactifs et E est le produit.

Il se pose alors la question des expériences qu'il faut effectuer pour optimiser en un minimum de mesures les performances du catalyseur choisi. Chaque expérience est effectuée relativement à un jeu de valeurs de paramètres (conditions opératoires) ayant une influence sur le résultat de l'expérience (réponses).

Exemple (cas d'un seul réactif)

De paramètres : Température, masse de catalyseur, concentration du réactif, débit à l'entrée du réacteur... Des valeurs sont fixées pour ces paramètres et les expériences sont réalisées. Il convient de définir les valeurs extrêmes de tous les paramètres (hautes et basses) pour compléter définir l'espace de travail qui sera étudié.

De critères (ou réponses) permettant d'évaluer les performances du catalyseur : le pourcentage du réactif consommé.

Dans le cas de 3 paramètres pouvant prendre chacun 3 niveaux, l'exploration complète de l'espace (dit espace de travail) nécessite la réalisation de 27 expériences.

En résumé, le problème peut se résumer en : quel jeu de paramètres faut-il utiliser pour optimiser une réponse donnée ?

Même en utilisant les robots de dernière génération de la plateforme REALCAT il faut être capable de limiter le nombre d'expérience à réaliser.

Des méthodes statistiques existent, basées sur les plans d'expériences (Design of experiments). Comme par exemple la méthode de Box-Behnken (les principes de cette méthode peuvent être trouvés [ici](#) par exemple). Cette méthode est déjà utilisée par l'UCCS.

Le travail envisagé durant ce « projet Impact ».

Nous souhaitons comme point de départ conduire une analyse des performances de la méthode de Box-Behnken pour mieux cerner ses limites. Pour travailler sur ce point nous bénéficierons du savoir-faire des chercheurs de l'UCCS dans ce domaine.

Dans un deuxième temps, nous souhaitons évaluer l'opportunité de l'utilisation d'autres méthodes statistiques plus génériques. Dans ce cadre, l'analyse de la méthode ANOVA (ANalysis Of VAriance) pourrait être un point de départ (les principes de cette méthode peuvent être trouvés [ici](#) par exemple).