

PROPOSITION DE SUJET D'IMPACT :
TRAITEMENT DE DONNEES ISSUES DU CRIBLAGE CATALYTIQUE
HAUT-DEBIT

Tuteurs

- Pierre Chainais (pierre.chainais@centralelille.fr),
- Sébastien Paul (sebastien.paul@centralelille.fr),
- Joëlle Thuriot (joelle.thuriot@univ-lille.fr).

Contexte du projet

Ce projet IMPACT est lié à l'Équipement d'Excellence REALCAT (plateforme intégrée Appliquée au criblage haut débit de Catalyseurs pour les bioraffineries) installée dans les murs de Centrale Lille (Figure 1). Cette plateforme permet la mise au point des procédés catalytiques qui seront utilisés dans l'industrie chimique de demain dans le contexte du déploiement de la bioéconomie. Ces procédés devront donc s'affranchir de leur trop forte dépendance aux ressources fossiles qui sont, on le sait, disponibles en quantité limitée et dont l'usage impacte très fortement notre environnement. Ces recherches comportent trois étapes : la synthèse chimique de nouveaux catalyseurs, leur analyse (leur caractérisation dans le jargon des chimistes) et, enfin, la mesure de leurs performances pour une réaction d'intérêt donnée. Ce processus de développement est généralement long et coûteux si on utilise l'approche expérimentale « essai-erreur » traditionnelle.



Figure 1 : Quelques équipements haut-débit de la plateforme REALCAT

Le criblage catalytique haut débit

Ces développements peuvent cependant être grandement accélérés en utilisant les équipements automatisés et parallélisés à haut-débit de la plateforme REALCAT (www.realcat.fr). REALCAT est une plateforme expérimentale pilotée par l'Unité de Catalyse et Chimie du Solide en partenariat fort avec le laboratoire CRISAL qui est en charge du volet traitement des données issues de ces outils de criblage catalytique haut débit. Ce dernier consiste en une exploration systématique de bibliothèques de catalyseurs qu'il faut donc synthétiser, caractériser et tester en réaction. Le criblage catalytique haut débit tire profit de la mise en parallèle et de l'automatisation des traitements liés à ces opérations. Ce faisant, les équipements de la plateforme REALCAT génèrent des grandes quantités de données qu'il faut traiter et interpréter afin de pouvoir définir la prochaine génération de catalyseurs en suivant une boucle de progrès continu (Figure 2). L'objectif est bien entendu de converger le plus rapidement possible vers un catalyseur optimal.

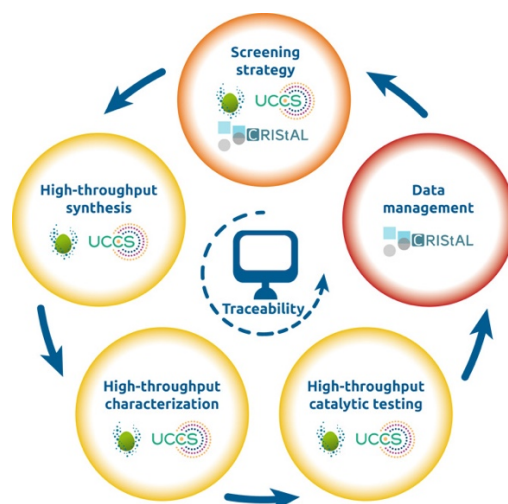


Figure 2 : Boucle de progrès du développement d'un nouveau catalyseur

Le projet

Le projet consistera donc à analyser les données générées par les divers équipements de REALCAT puis à les traiter afin d'établir des corrélations entre les propriétés physico-chimiques des catalyseurs (données issues de la caractérisation et dépendante des conditions de synthèse employées) et leurs performances en réaction (un indicateur typique est le rendement en molécule d'intérêt). Ces corrélations serviront ensuite à optimiser les formulations des catalyseurs et donc leurs performances.

Ce projet IMPACT devrait permettre à son auteur de découvrir les diverses techniques employées par les chimistes pour développer de nouveaux catalyseurs, la plateforme REALCAT unique au monde mais aussi et surtout d'appréhender les données d'entrée et de sortie du système et de développer une méthode de traitement qui permettra d'établir les corrélations précitées et qui contribuera donc à encore accélérer le processus de développement des procédés catalytiques. La diversité de formats des données nécessitera probablement la mise au point d'une étape préalable de prétraitement des données avant de pouvoir les manipuler pour établir les corrélations recherchées. L'équipe REALCAT dispose déjà de jeux de données collectées lors de leurs récents programmes de recherche. Ils pourront servir de base pour lancer le projet.