

JUNIA
41 Bd Vauban
59014 Lille Cédex

État de l'art et étude de faisabilité

Développement d'un outil de calcul automatisé pour les paramètres de la chimie verte

Enseignant référent : Muriel BILLAMBOZ

Référent de formation : Kahina HASSAM

Florian DECROIX
Clément GREZ
Amyr HAMAD
Alexandre HERSENS
Romain LANNOY
Fabien SACEPE

Table des matières

1. État de l'art.....	1
1.1. Problématique	1
1.2. Évaluation de l'impact environnemental en chimie verte	2
1.3. Automatisation des calculs.....	2
1.4. Accès aux informations nécessaires à la chimie verte	3
1.5. Limites.....	3
1.6. Synthèse.....	4
2. Étude de faisabilité	5
2.1. Identification des risques et alternatives	5
2.1.1. Intégration des données	5
2.1.2. Complexité de l'interface utilisateur.....	5
2.1.3. Maintenance et évolutivité	6
2.1.4. Collecte des informations moléculaires.....	6
2.1.5. Sécurité des données, confidentialité et accessibilité	7
2.2. Stratégie.....	7

1. État de l'art

1.1. Problématique

La chimie verte, ou chimie durable, représente une approche innovante dans le domaine de la chimie, visant à concevoir des procédés et des produits qui minimisent l'impact écologique. Dans un contexte où les enjeux environnementaux sont de plus en plus pressants, il est crucial de se poser la question suivante :

Comment développer des outils de calcul intuitifs qui intègrent les principes de la chimie verte afin de soutenir les chercheurs et les étudiants dans l'évaluation de l'impact écologique des réactions chimiques, tout en optimisant l'accès à l'information et en sensibilisant à l'importance d'une chimie durable ?

Cette problématique soulève plusieurs enjeux. Tout d'abord, il est essentiel d'évaluer l'impact environnemental des processus chimiques. Les principes de la chimie verte, tels que la prévention des déchets et l'utilisation de ressources renouvelables, visent à réduire l'empreinte écologique des produits chimiques (source : LCC Toulouse ; source : Culture Sciences). Il est donc impératif de quantifier et d'analyser ces effets afin de promouvoir des pratiques durables.

Ensuite, l'automatisation des calculs constitue un autre enjeu majeur. La complexité des évaluations environnementales peut constituer un obstacle pour les utilisateurs. Le développement d'outils automatisés facilitera cette tâche et permettra aux chercheurs d'obtenir rapidement des résultats pertinents (source : ACS Green Chemistry).

Un troisième point concerne l'accès à l'information. Dans un domaine où les connaissances évoluent rapidement, la mise à disposition d'informations pertinentes et facilement accessibles est primordiale pour favoriser l'innovation (source : Royal Society of Chemistry). La sensibilisation à la chimie verte est également un aspect fondamental, car éduquer les utilisateurs sur ses principes peut encourager des pratiques durables et éthiques dans le domaine de la chimie.

Ainsi, cette recherche se doit d'explorer comment ces outils peuvent être conçus pour répondre efficacement à ces défis tout en intégrant les fondements de la chimie verte, tels que l'économie d'atomes et l'efficacité énergétique (source : ACS Green Chemistry ; source : Royal Society of Chemistry).

1.2. Évaluation de l'impact environnemental en chimie verte

L'évaluation de l'impact environnemental des processus chimiques est cruciale pour promouvoir des pratiques durables, et cela passe par l'intégration des principes de la chimie verte. Cette approche, qui vise à concevoir des produits et des procédés chimiques minimisant l'usage et la génération de substances nocives, repose sur plusieurs principes clés. Parmi eux, la prévention des déchets et l'adoption de ressources renouvelables se démarquent (source : CultureSciences Chimie).

En évitant la production de déchets dès la conception, et en privilégiant des matériaux issus de sources renouvelables, on réduit non seulement les impacts environnementaux, mais également les coûts associés à la gestion des déchets. De plus, l'évaluation de l'efficacité des réactions chimiques, à travers des outils comme l'utilisation atomique ou le facteur E, permet de quantifier et d'analyser les pertes de matières et d'énergie (source : ACS Green Chemistry). Cela favorise une optimisation des procédés chimiques, contribuant ainsi à une économie circulaire plus respectueuse de l'environnement.

En fin de compte, l'objectif de la chimie verte est d'harmoniser les exigences industrielles et écologiques, tout en sensibilisant et éduquant les acteurs du secteur sur l'importance de pratiques chimiques durables (source : RSC Green Chemistry).

1.3. Automatisation des calculs

La complexité des évaluations environnementales peut constituer un obstacle pour les utilisateurs, rendant essentiel le développement d'outils automatisés. Ces outils permettent de simplifier les processus de calcul, d'accélérer les résultats et de rendre l'information plus accessible. En intégrant des interfaces ergonomiques et intuitives, les utilisateurs peuvent effectuer des calculs complexes sans nécessiter une expertise approfondie en chimie ou en analyse environnementale (source : Ferrazini, 2005).

Par ailleurs, l'utilisation de normes ergonomiques et d'approches centrées sur l'utilisateur, comme les heuristiques de Nielsen et les principes de la psychologie cognitive, favorise une expérience utilisateur améliorée, essentielle pour encourager l'adoption de ces outils automatisés (source : ENE, 2019).

En simplifiant l'accès aux informations et en réduisant le temps nécessaire pour obtenir des résultats pertinents, l'automatisation des calculs joue un rôle crucial dans la promotion des pratiques de chimie verte (source : W3C, 2020).

1.4. Accès aux informations nécessaires à la chimie verte

L'accès à des informations pertinentes et facilement accessibles est essentiel pour favoriser l'innovation dans le domaine de la chimie verte. Dans ce contexte, plusieurs bases de données se démarquent par leur capacité à fournir des données cruciales sur les substances chimiques et leurs propriétés.

PubChem est géré par le NCBI et propose des informations détaillées sur des millions de molécules, facilitant le calcul de l'énergie de réaction (ΔH) et l'efficacité de réaction massique (ERM) grâce à ses données thermodynamiques (source : PubChem API). **ChemSpider**, fourni par la Royal Society of Chemistry, permet également le calcul du facteur E, essentiel pour évaluer la durabilité des procédés chimiques (source : ChemSpider API). La base de données **ZINC** aide à identifier des réactifs écologiques, optimisant ainsi les processus chimiques tout en réduisant leur impact environnemental (source : ZINC API). L'**ECHA** fournit des informations sur les risques associés aux substances, permettant une gestion plus sûre et durable des réactifs chimiques (source : ECHA API). Enfin, **Simapro** est un outil d'analyse du cycle de vie qui aide à évaluer les impacts environnementaux des procédés chimiques, contribuant à leur optimisation (source : Simapro).

En intégrant ces ressources, notre application pourra automatiser les calculs nécessaires et améliorer la prise de décisions en chimie verte.

1.5. Limites

Plusieurs limites et insuffisances peuvent être mises en avant en vue d'identifier les besoins auxquels les solutions actuelles ne répondent pas entièrement. Bien que les principes de la chimie verte et les méthodes de calcul d'impact environnemental soient bien établis, leur application reste souvent complexe et peu accessible pour les utilisateurs sans expertise approfondie. Les outils actuels ne permettent pas toujours de simplifier suffisamment le processus, rendant l'automatisation des calculs de durabilité difficile à intégrer dans des pratiques de recherche quotidienne.

De plus, les bases de données existantes, bien qu'abondantes, ne sont pas toujours interopérables et ne fournissent pas une interface utilisateur optimisée pour une consultation rapide et pertinente dans un contexte de calcul environnemental. PubChem, ChemSpider ou ECHA, par exemple, offrent des données précieuses, mais elles manquent de connexions directes pour des calculs automatisés d'indicateurs spécifiques de chimie verte, tels que le facteur E ou l'efficacité atomique, sans nécessiter un travail de compilation supplémentaire par les utilisateurs.

Enfin, les méthodes actuelles n'intègrent pas toujours les principes de la chimie verte de manière holistique. Elles se concentrent sur certains aspects – comme la réduction des déchets – sans inclure systématiquement l'ensemble des paramètres environnementaux, comme l'énergie utilisée

ou la toxicité des sous-produits, pourtant cruciaux dans une évaluation complète. Cette approche morcelée limite la possibilité de concevoir des processus durables de bout en bout.

Pour dépasser ces limites, un outil plus intégré et automatisé est nécessaire pour permettre aux chercheurs d'accéder rapidement aux données et aux calculs, tout en tenant compte des différentes dimensions de la chimie verte dans une interface intuitive et adaptable. Cela permettrait non seulement une application plus efficace des principes de la chimie verte mais aussi une évaluation exhaustive de l'impact environnemental des processus chimiques.

1.6. Synthèse

La chimie verte vise à réduire l'impact écologique des produits et procédés chimiques en intégrant des principes durables, comme la prévention des déchets et l'usage de ressources renouvelables. Dans ce contexte, le défi est de créer des outils intuitifs pour aider chercheurs et étudiants à évaluer l'impact écologique des réactions chimiques et faciliter l'accès à des informations actualisées. Cela implique trois axes majeurs : évaluer l'impact environnemental via des indicateurs comme l'efficacité atomique ou le facteur E ; automatiser les calculs pour simplifier les processus complexes ; et offrir un accès optimisé aux bases de données comme PubChem et ChemSpider.

Cependant, l'état de l'art montre plusieurs limites. Les outils de calcul actuels restent complexes, peu accessibles, et nécessitent souvent une expertise avancée. Les bases de données, bien que riches, ne sont pas pleinement interopérables ni adaptées à des calculs automatisés des indicateurs de chimie verte, obligeant les utilisateurs à des travaux de compilation manuelle. Enfin, les méthodes disponibles tendent à se concentrer sur des aspects spécifiques, comme la réduction des déchets, sans intégrer de manière holistique les paramètres environnementaux essentiels, tels que la consommation d'énergie et la toxicité des sous-produits.

Pour répondre à ces limites, un outil automatisé et intégré serait nécessaire, combinant une interface intuitive et une évaluation complète des impacts environnementaux. Cela permettrait une adoption plus large et plus efficace des pratiques de chimie verte, tout en fournissant une évaluation environnementale exhaustive pour des choix éclairés en recherche et en industrie.

2. Étude de faisabilité

2.1. Identification des risques et alternatives

Dans la mise en place d'un outil automatisé pour le calcul et la représentation graphique des paramètres de chimie verte, plusieurs risques doivent être pris en compte pour garantir le succès et la durabilité du projet.

2.1.1. Intégration des données

L'intégration de données provenant de bases variées, comme PubChem (National Center for Biotechnology Information, USA), l'ECHA (Agence européenne des produits chimiques) ou l'INRS (Institut national de recherche et de sécurité), est essentielle pour obtenir des informations complètes et actualisées, mais elle comporte plusieurs défis d'interopérabilité et de fiabilité. Chaque base de données suit ses propres normes de structuration, protocoles de mise à jour et terminologies, ce qui peut entraîner des incohérences lorsqu'elles sont combinées dans un même système d'information.

De plus, la fréquence de mise à jour et les normes de qualité de chaque base varient, ce qui peut influencer la précision des données collectées. Il ne faut pas non plus ignorer l'empreinte carbone d'une solution intégrant les données de serveurs qui peuvent être à plusieurs centaines voire milliers de kilomètres.

Pour pallier ces difficultés, il est envisagé de mettre en place une base de données "maison" dont la structure sera adaptée en fonction des besoins de l'outil et qui pourra être enrichie pour répondre aux besoins futurs. Il est proposé de mettre en place des routines pour ponctuellement mettre à jour le catalogue interne, minimisant ainsi le nombre de requêtes vers des serveurs éloignés. Bien que cela nécessite une infrastructure technique supplémentaire, cette approche assure une meilleure qualité des données, indispensable pour des travaux de recherche dont les besoins sont susceptibles d'évoluer.

2.1.2. Complexité de l'interface utilisateur

Un risque important dans le développement de cet outil réside dans la facilité d'utilisation. Bien que l'interface soit pensée pour être ergonomique, certaines fonctionnalités pourraient s'avérer complexes. En effet, les calculs de chimie verte nécessitent la complétion de nombreux champs et l'outil actuel, une feuille de calcul Excel, manque cruellement de convivialité, les chercheurs ayant souvent du mal à distinguer les champs indispensables et éditables de ceux constants. Ce manque de convivialité se fera d'autant plus ressentir si un public novice, tel que des étudiants qui se familiarisent pour la première fois avec les concepts de chimie verte, se retrouve confronté à une interface mal pensée.

Par ailleurs, la richesse fonctionnelle de l'outil, bien que bénéfique pour une analyse complète, comporte un risque de surcharge d'informations, rendant la navigation moins intuitive. Une interface qui expose d'emblée l'ensemble des fonctionnalités avancées peut rapidement devenir difficile à appréhender pour des étudiants qui cherchent des calculs simples et une compréhension progressive des indicateurs de chimie verte. Cette surcharge d'informations pourrait entraîner une perte d'engagement de la part des utilisateurs débutants, qui pourraient se sentir submergés face à une multitude d'options et d'informations complexes.

De plus, l'outil doit pouvoir répondre aux besoins hétérogènes des différents profils d'utilisateurs, qu'ils soient étudiants, enseignants ou chercheurs expérimentés. Les attentes ne sont pas les mêmes pour ces groupes : les étudiants bénéficieraient d'un accompagnement progressif centré sur les calculs de base et des explications pédagogiques, tandis que les chercheurs auraient besoin d'un accès rapide à des fonctionnalités plus avancées, leur permettant de réaliser des analyses détaillées sans être ralentis par des explications introductives. Sans une segmentation adaptée de l'interface, il existe un risque de rendre l'outil frustrant et peu intuitif pour ces profils diversifiés, réduisant son impact pédagogique et pratique.

Face à ces limites, une alternative viable serait de structurer l'outil en niveaux d'accès différenciés : une version simplifiée pour les étudiants et une version avancée pour les chercheurs et professionnels. Cette distinction permettrait de proposer une interface adaptée à chaque niveau de compétence, garantissant ainsi une meilleure expérience utilisateur et une utilisation optimisée des fonctionnalités selon les besoins spécifiques de chaque groupe.

2.1.3. Maintenance et évolutivité

L'automatisation complète des calculs peut aussi poser des défis en matière de maintenance et de mise à jour. Il existe un risque que l'outil devienne obsolète si les critères de chimie verte évoluent ou si de nouveaux indicateurs sont ajoutés. Pour répondre à cela, l'architecture devra permettre d'ajuster facilement les algorithmes de calcul et d'ajouter de nouveaux paramètres en fonction des avancées scientifiques.

2.1.4. Collecte des informations moléculaires

La dépendance aux codes CAS ou aux schémas moléculaires pour collecter les données représente une contrainte potentielle. Il peut être difficile de trouver ces informations pour certaines molécules moins documentées. Proposer de modéliser les molécules directement dans l'application, afin de faciliter l'utilisation de l'outil pourrait poser problème dans la récupération des données moléculaires.

L'intégration à l'outil d'un module de modélisation des schémas moléculaires représente en lui-même un risque. Selon l'architecture finale convenue, plusieurs solutions existent pour dessiner des molécules mais la nature des informations retournées par ces outils varie. Actuellement, les molécules sont dessinées dans ChemsSketch afin de rassembler les informations nécessaires aux

calculs. Pour minimiser les risques, un module d'import de fichiers Chemskech pourrait être développé dans le but de renseigner automatiquement les données nécessaires aux calculs.

2.1.5. Sécurité des données, confidentialité et accessibilité

La sécurité des données est aussi un point important. Si les recherches portent sur des procédés industriels ou des produits en développement, elles doivent être protégées contre toute fuite ou usage non autorisé. Une alternative consisterait à ajouter un cryptage des données et un contrôle d'accès sécurisé, garantissant la confidentialité des informations sensibles et le respect des règles de protection des données.

L'hébergement de l'outil sur le réseau interne de Junia pourrait poser des difficultés, notamment en ce qui concerne l'accès pour les étudiants. Le déploiement sur un réseau interne peut être complexe et pourrait limiter l'accessibilité de l'outil hors du campus, ce qui restreindrait l'usage de la plateforme dans un contexte pédagogique à distance ou en travail autonome. L'outil pourrait être hébergé en dehors du réseau Junia, de la même manière que Junia-learning afin de permettre l'accès à tous avec une limite d'authentification.

2.2. Stratégie

La stratégie adoptée pour ce projet repose sur une architecture modulaire et évolutive, permettant de répondre aux besoins actuels tout en laissant une flexibilité pour intégrer de futures améliorations. La solution technique sera développée en suivant une approche orientée vers l'utilisateur, garantissant que chaque fonctionnalité clé, comme le calcul automatique des paramètres de chimie verte et la représentation graphique, soit intuitive et adaptée aux différents profils d'utilisateurs (étudiants, chercheurs et enseignants). Le choix d'une interface à niveaux d'accès différenciés, avec une version simplifiée pour les débutants et une version avancée pour les utilisateurs expérimentés, assurera une expérience utilisateur optimisée, rendant l'outil accessible et utile pour tous.

Pour réduire les risques liés à l'intégration des données, la stratégie prévoit une base de données interne actualisée à partir de sources fiables comme PubChem et l'INRS, tout en minimisant le nombre de requêtes vers des serveurs distants. L'outil sera conçu de manière à pouvoir être maintenu et mis à jour facilement, garantissant sa durabilité dans un contexte d'évolution continue des normes en chimie verte. En parallèle, des protocoles de sécurité renforcés seront mis en place pour protéger les données, avec un accès limité aux utilisateurs autorisés de Junia, et la possibilité d'intégrer des systèmes de cryptage et d'authentification renforcée si besoin.

En termes de méthodologie, l'approche Kanban et le développement piloté par les tests (TDD) permettront une livraison progressive et continue des fonctionnalités, facilitant la détection et la correction des erreurs au fil du développement. Cette flexibilité, alliée à un processus de validation régulier impliquant les utilisateurs finaux, garantira que l'outil répondra aux attentes des parties prenantes tout en s'assurant de sa robustesse et de son ergonomie.

Bibliographie

Sources générales

- ACS Green Chemistry : <https://www.acs.org/greenchemistry.html>
- Avogadro : <https://avogadro.cc/>
- Culture Sciences : <https://culturesciences.chimie.ens.fr/thematiques/chimie-et-societe/environnement/introduction-a-la-chimie-verte>
- Ferrazini, 2005 : <https://bbf.enssib.fr/consulter/bbf-2005-03-0076-004>
- HDF5 : <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>
- Heuristiques de Nielsen (10 heuristiques d'utilisabilité) : <https://www.nngroup.com/articles/ten-usability-heuristics/>
- Simapro : <https://simapro.com/>
- Royal Society of Chemistry : <https://www.rsc.org/journals-books-databases/about-journals/green-chemistry/>

Normes ISO

- ISO 9241-11 : <https://www.iso.org/standard/63500.html>
- ISO 9241-210 (Ergonomie de l'interaction homme-système) : <https://www.iso.org/standard/52075.html>
- ISO/IEC 12207 : <https://www.iso.org/standard/63712.html>

API

- ChemSpider API : <https://developer.rsc.org/compounds-v1/apis>
- ECHA API : <https://echa.europa.eu/fr/information-on-chemicals>
- PubChem API : <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/docs/pug-rest>
- ZINC API : <http://zinc15.docking.org/>

Librairies graphiques

- JSME Molecular Editor : <https://jsme-editor.github.io/>
- JSmol : http://wiki.jmol.org/index.php/Main_Page
- MarvinJS : <https://marvinjs-demo.chemaxon.com/latest/>
- MolView : <http://molview.org/>

Lois et directives

- Code de la propriété intellectuelle : <https://www.legifrance.gouv.fr/codes/id/LEGISCTA000006133323/>
- Directive 2001/29/CE : <https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT0000000523361>
- Directive Européenne sur l'accessibilité numérique : <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/FR/TXT/?uri=CELEX%3A32016L2102>
- Loi pour une République numérique (France) : <https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT000033202746>
- REACH Regulation : <https://echa.europa.eu/fr/regulations/reach>
- Protocole de Montréal : <https://ozone.unep.org/treaties/montreal-protocol>

Autres

- FAIR Principles : <https://www.go-fair.org/fair-principles/>
- SMILES : <https://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>