

JUNIA  
2 rue Norbert Ségard  
59014 Lille cedex

## **Rapport : bibliographie et étude de faisabilité**

Chimie verte : Développement d'un outils de  
calculs automatisés

**Enseignante référente :** Muriel BILLAMBOZ  
**Référente de formation :** Kahina HASSAM

**Groupe de recherche :**

Romain LANNOY  
Fabien SACEPE  
Floriant DECROIX  
Amyr HAMAD  
Alexandre HERSSSENS  
Clément GREZ

# Table des matières

<b>État de l'art.....</b>	<b>3</b>
<b>1. Problématique.....</b>	<b>3</b>
<b>2. Recherche.....</b>	<b>4</b>
2.1 Évaluation de l'impact environnemental en chimie verte.....	4
2.2 Automatisation des calculs.....	4
2.3 Accès à l'information : Comparaison des bases de données pour la chimie verte	4
<b>3. Critique.....</b>	<b>5</b>
<b>4. Synthèse.....</b>	<b>6</b>
<b>Étude de faisabilité.....</b>	<b>6</b>
<b>1. Risques et Alternatives.....</b>	<b>6</b>
1.1 Risque d'interopérabilité et fiabilité des bases de données.....	6
1.2 Risque lié à la complexité de l'interface utilisateur.....	7
1.3 Risque de maintenance et d'évolutivité.....	7
1.4 Risque de dépendance aux codes CAS et schémas moléculaires.....	7
1.5 Risque de sécurité des données et confidentialité.....	7
1.6 Hébergement et accès pour les étudiants de Junia.....	7

# État de l'art

## 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).

## **2. Recherche**

### **2.1 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 (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 (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 (RSC Green Chemistry).

### **2.2 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 (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 (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 (W3C, 2020).

### **2.3 Accès à l'information : Comparaison des bases de données pour 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 ( $\Delta H$ ) et l'efficacité de réaction massique (ERM) grâce à ses données thermodynamiques (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 (ChemSpider API). La base de données ZINC aide à identifier des réactifs écologiques, optimisant ainsi les processus chimiques tout en réduisant leur impact environnemental (ZINC API). L'ECHA fournit des informations sur les risques associés aux substances, permettant une gestion plus sûre et durable des réactifs chimiques (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 (Simapro). En intégrant ces ressources, notre application pourra automatiser les calculs nécessaires et améliorer la prise de décisions en chimie verte.

### **3. Critique**

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.

## **4. 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.

## **Étude de faisabilité**

### **1. 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.

#### **1.1 Risque d'interopérabilité et fiabilité des bases de données**

Un premier risque concerne la compatibilité entre les différentes bases de données et la précision des informations. La collecte de données actualisées à partir de bases comme PubChem, ChemSpider ou l'INRS, bien que essentielle, peut être compliquée. Cela pourrait ralentir les calculs automatisés et affecter la fiabilité des résultats. Une solution alternative serait de mettre en place un système de vérification croisée, afin de réduire les erreurs potentielles et d'augmenter la précision des données.

## 1.2 Risque lié à la complexité de l'interface utilisateur

Un autre risque concerne la facilité d'utilisation de l'outil. Bien que l'interface soit conçue pour être ergonomique, certaines fonctionnalités pourraient être difficiles à utiliser pour des étudiants débutants. Une alternative serait de développer des niveaux d'accès : une version simplifiée pour les étudiants et une version avancée pour les chercheurs et professionnels, afin de permettre à chaque utilisateur de profiter d'une interface adaptée à son niveau de compétence en chimie verte.

## 1.3 Risque de maintenance et d'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.

## 1.4 Risque de dépendance aux codes CAS et schémas 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.

## 1.5 Risque de sécurité des données et confidentialité

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.

## 1.6 Hébergement et accès pour les étudiants de Junia

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. Un outil en dehors du réseau Junia tel que Junia-Learning pourrait être proposé afin de permettre l'accès à tous avec une limite d'authentification.