

PROJET 5

Développement d'un outil automatisé de calcul et représentation graphique des paramètres de chimie verte

Contexte :

Dans le cadre du développement de procédés durables, le secteur de la chimie a mis en place l'utilisation des paramètres de chimie verte afin de mesurer/quantifier les impacts des procédés selon différents critères : quantité de déchets produite, rendement, recyclabilité...

Ces calculs sont généralement longs et fastidieux. Ils requièrent de collecter des informations sur les réactifs et produits ainsi que sur la manipulation en tant que telle.

Objectifs du projet :

Afin de faciliter le traitement des données, nous souhaiterions développer un outil informatisé permettant :

- 1) A partir d'une équation bilan, extraire les informations nécessaires des formules brutes et les lister (base de données). L'équation bilan sera dessinée sous un logiciel source de type ChemSketch
- 2) A partir des données pratiques et de l'équation bilan, générer les résultats du calcul des paramètres de chimie verte
- 3) Proposer une représentation graphique simple et lisible de ces différents paramètres à des fins de comparaison de différents procédés.

L'interface développée devra pouvoir être souple et s'adapter à une nouvelle équation bilan. Elle devra également être intuitive et visuelle.

Un catalogue des réactifs connus liés au numéro de référencement pourra être utilisé pour stocker l'information et enrichir la base de données en interne.