

EPFL

Swiss CAT+ @ EPFL

Une plateforme automatisée et pilotée par les données pour l'optimisation et la découverte de nouveaux catalyseurs

Dr Pascal Miéville

CCCTA - JS 2021



Le projet Swiss CAT+ en bref

Le staff

Les idées conductrices

La stratégie

L'opérationnel

La gestion des données

Mais où va-t-on ?

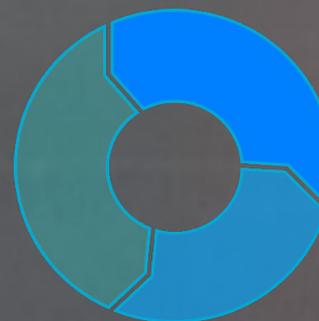
Le projet Swiss CAT+ en bref – en janvier 2020



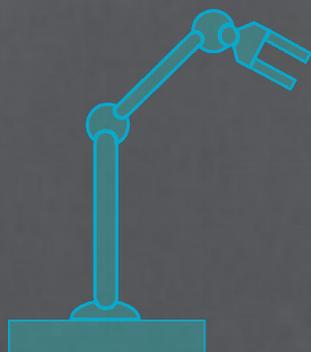
Pilotage par les données



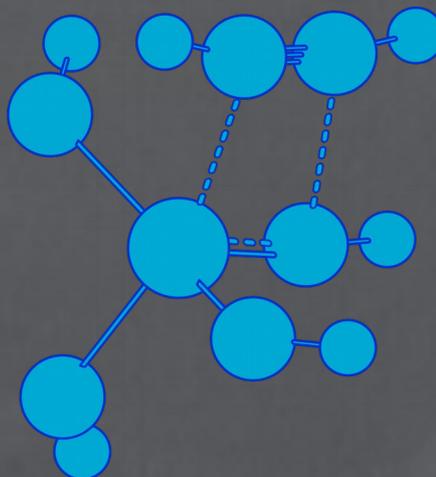
Développement d'un service



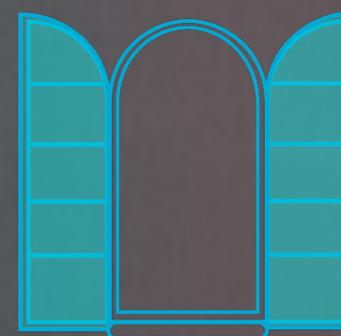
Infrastructure de développement



Haut degré d'automatisation

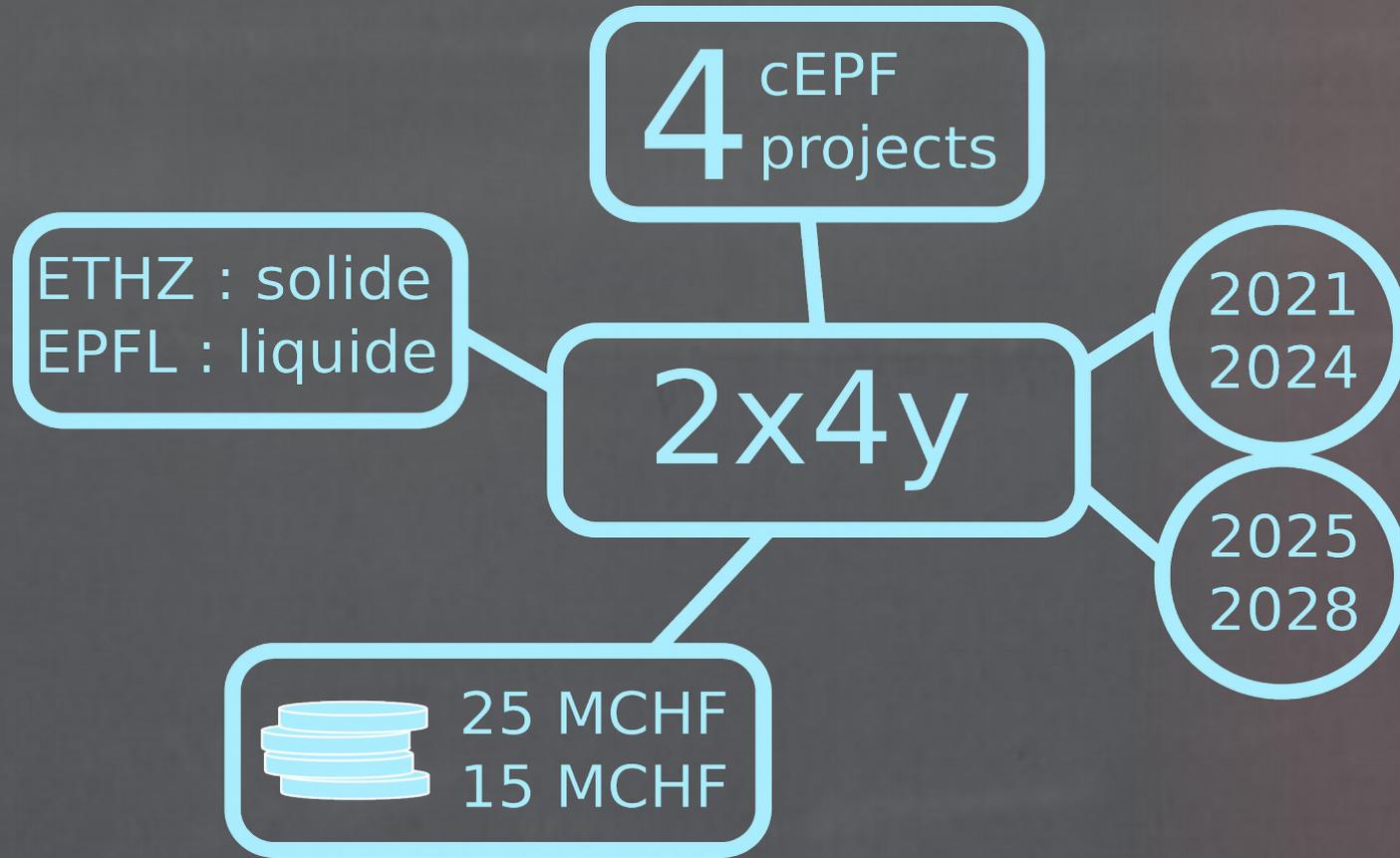


Découverte et optimisation de nouveaux catalyseurs



Infrastructure ouverte

Le projet Swiss CAT+ en bref



Le staff



Prof Nicolai Cramer – PI

Dr Pascal Miéville – Directeur Executif

Dr Florian de Nanteuil – Collaborateur scientifique

Mme Urielle Randrianarisoa – Chimiste

M Edy Mariano – Ingénieur HES robotique

Mme Heidi Francelet – Assistante administrative

Prochainement

Data officer

Laborantin-e en chimie

Plus de Médores et Goofies

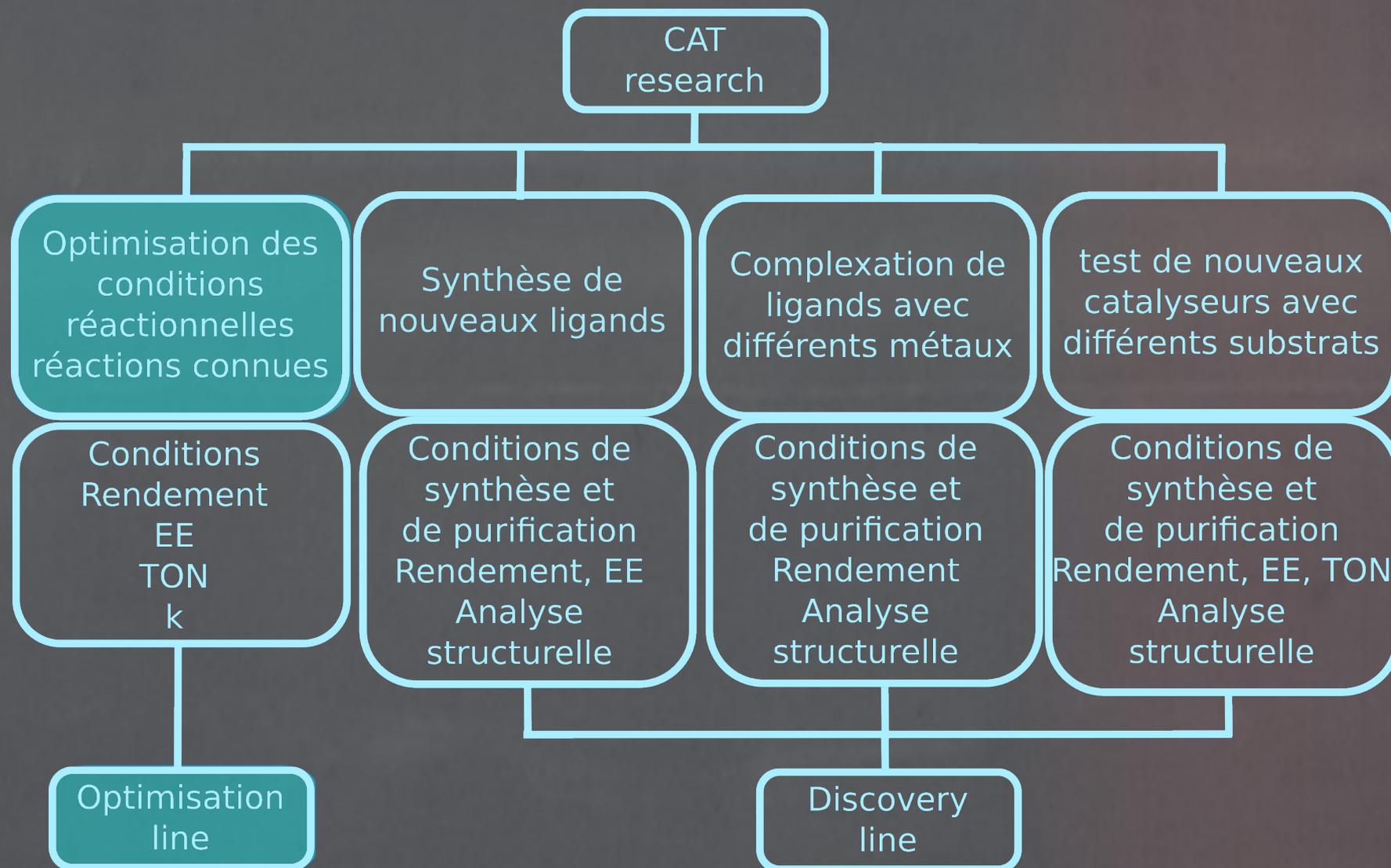


Médore
ou Goofy

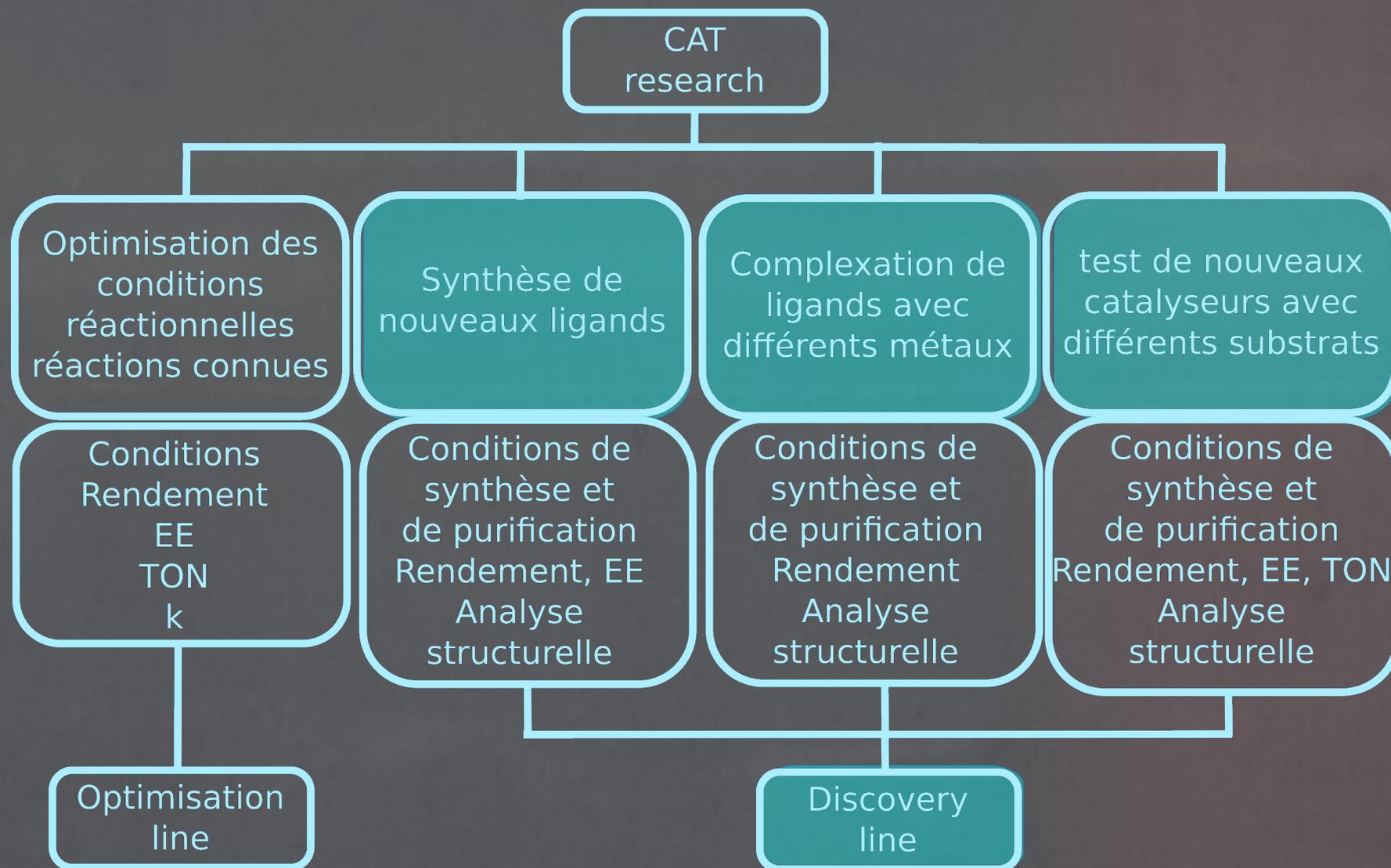
Les idées conductrices

- 1 Générateur de données expérimentales
- 2 Intégration totale des échantillons et des données
- 3 Préserver l'intégrité des données
- 4 GIGO - validation expérimentale constante
- 5 Adopter le point de vue des machines
- 6 Critiquer constamment les modèles ML

La stratégie

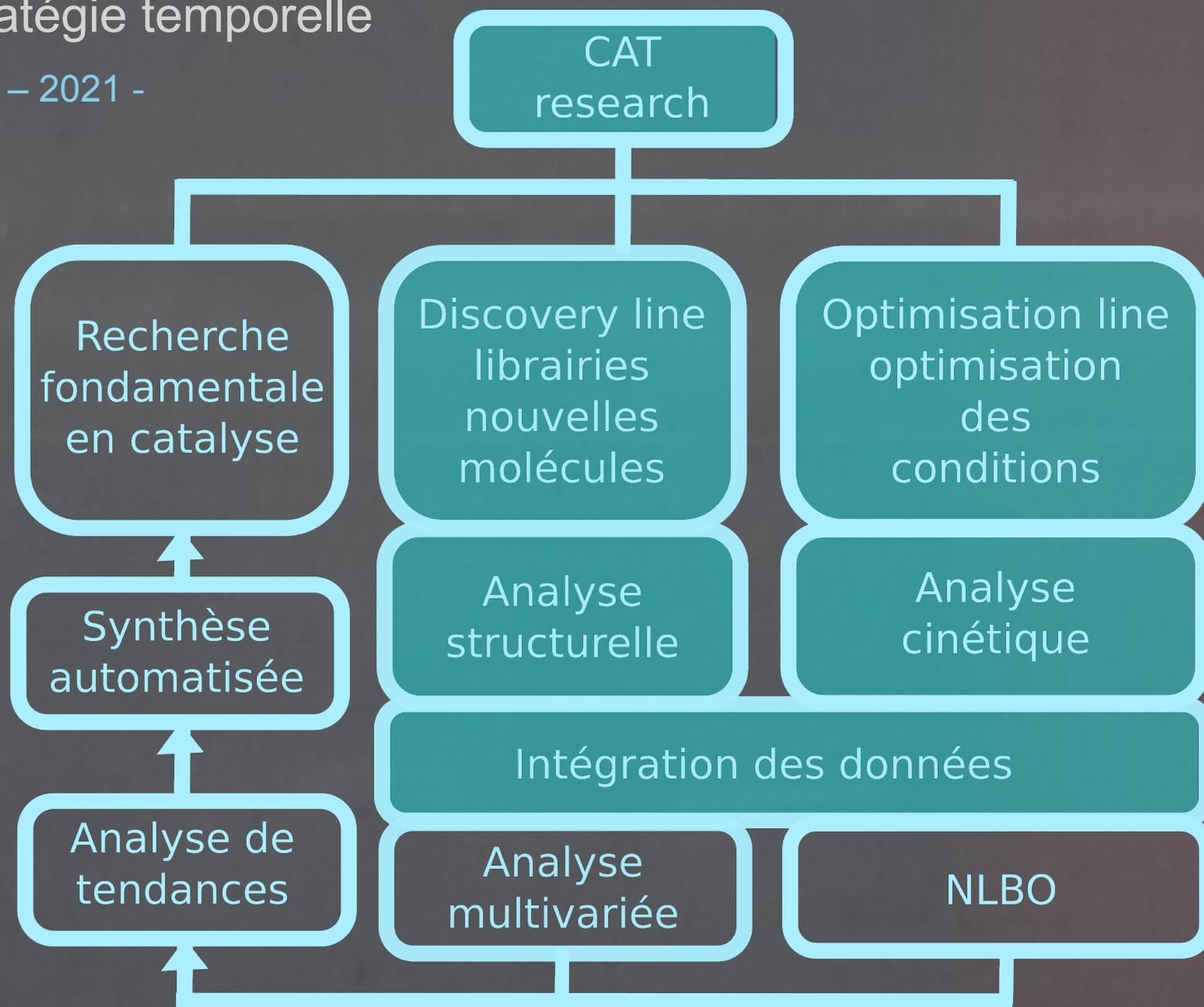


La stratégie



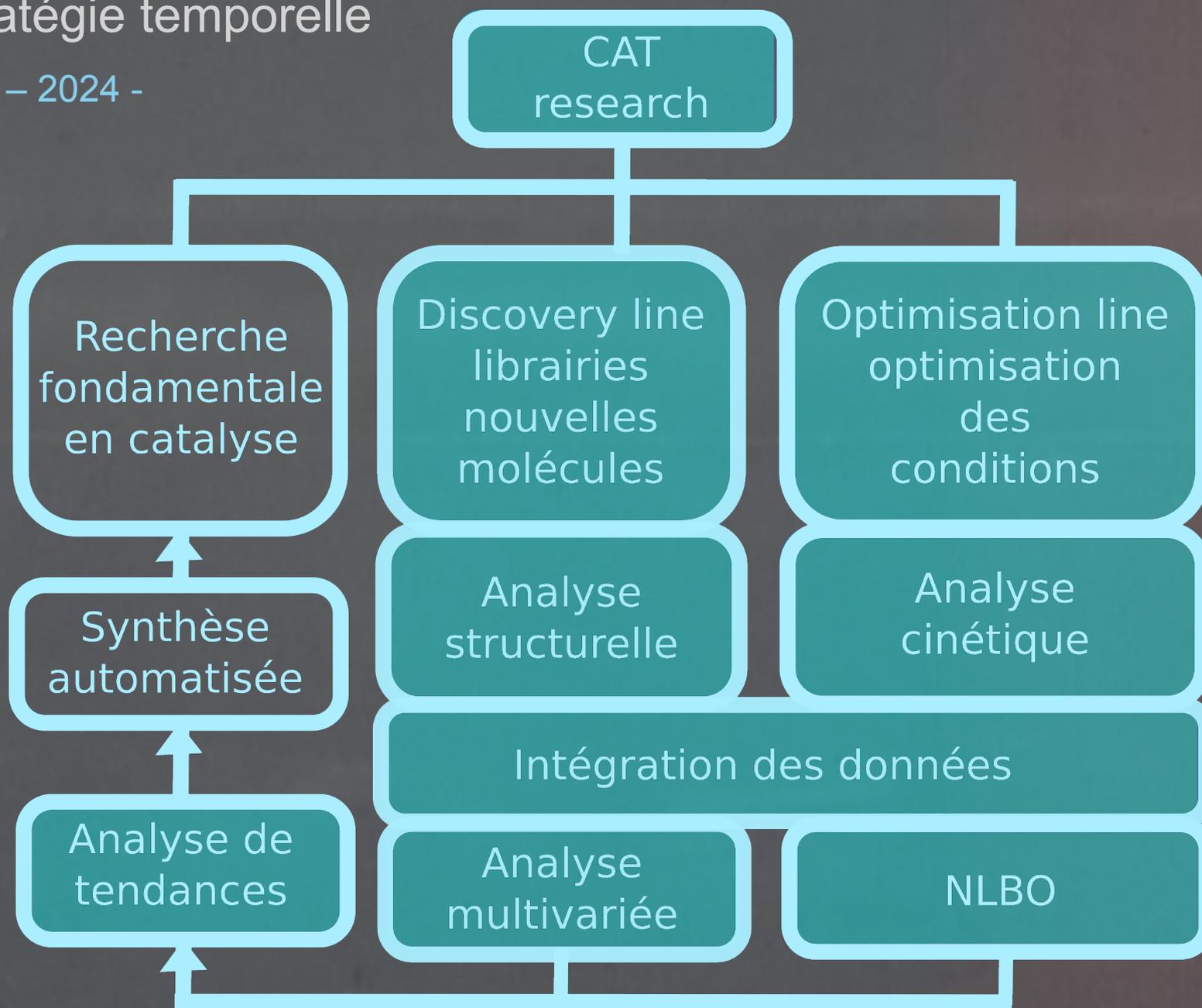
La stratégie temporelle

Étape 1 – 2021 -
2023



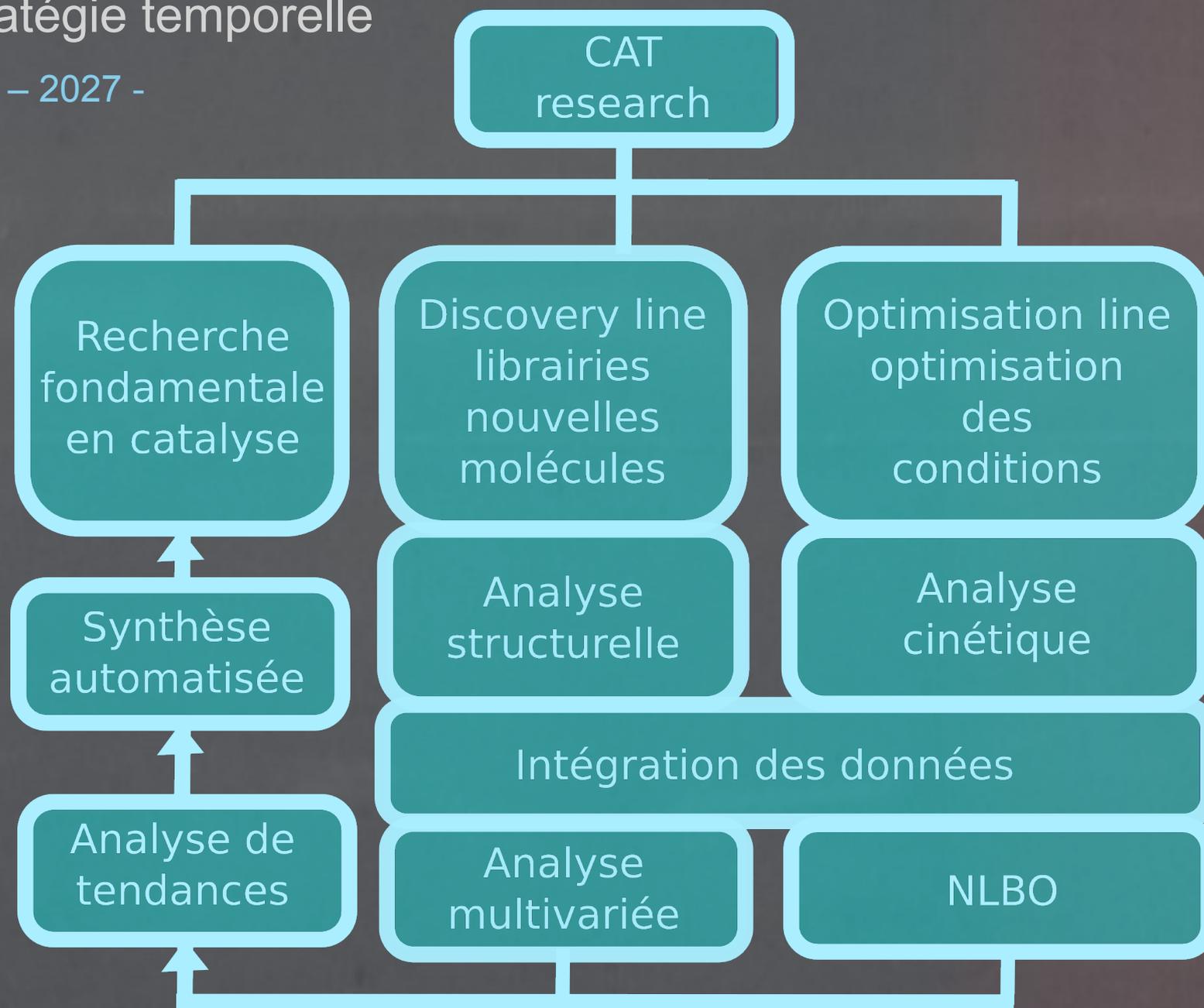
La stratégie temporelle

Étape 2 – 2024 -
2026

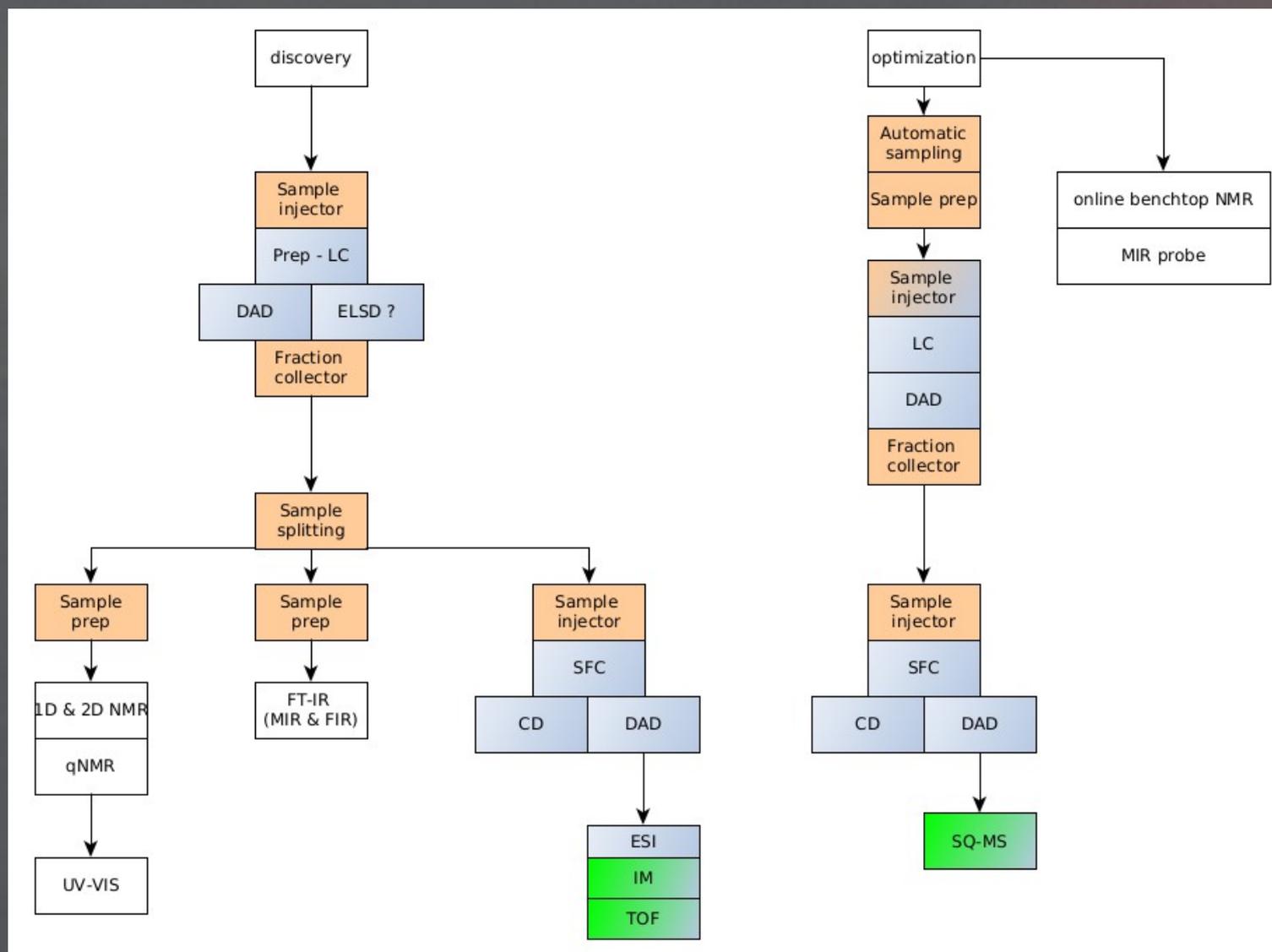


La stratégie temporelle

Étape 3 – 2027 -
2028

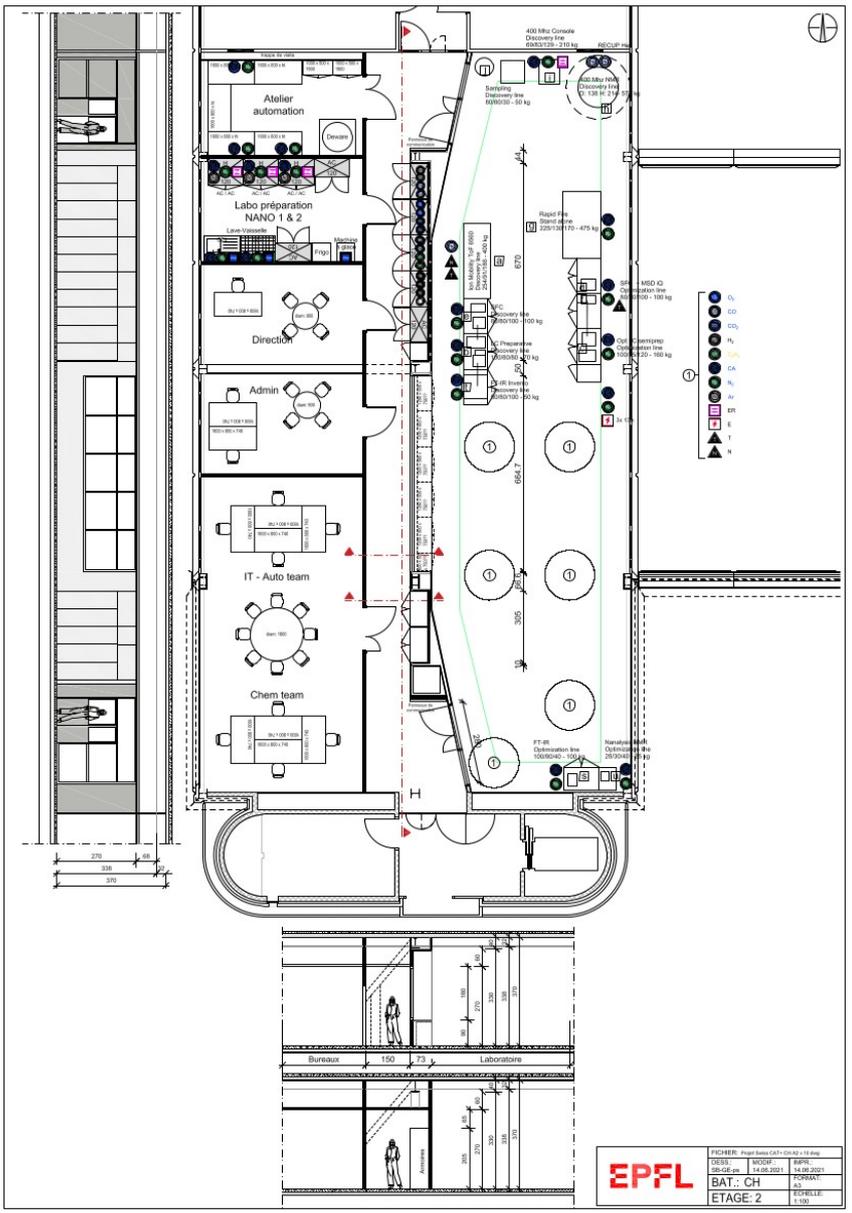


Le schéma analytique



Merci au Dr Davy Guillaume pour son aide dans l'analyse des besoins.

L'opérationnel



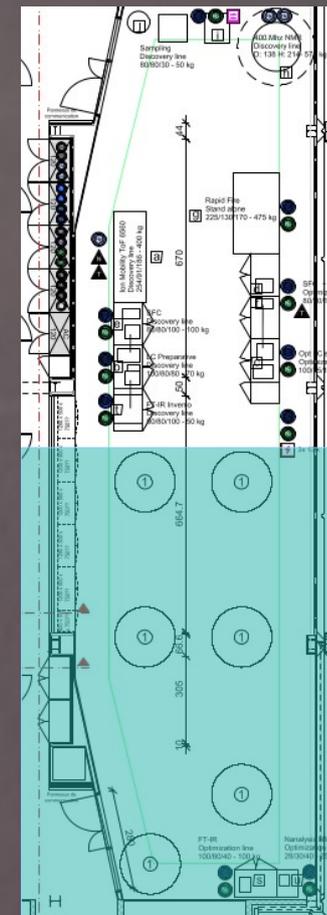
L'opérationnel – secteur synthèse / optimisation

Station de préparation des échantillons (boîte à gant)

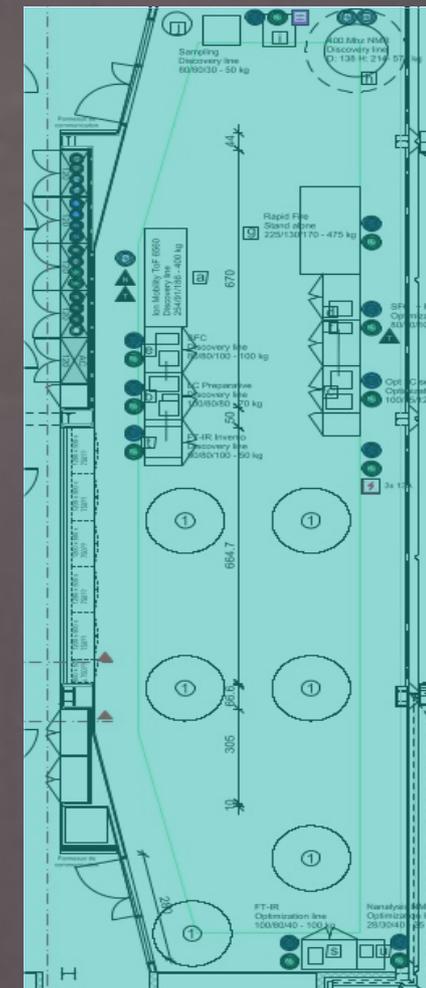
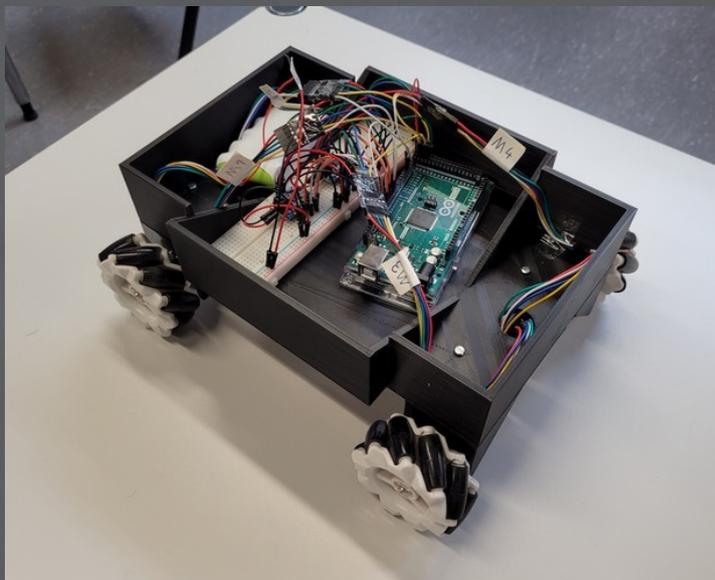
Station de stockage des échantillons en milieu inerte

Station multisynthèse (discovery, env. 100 réactions) en milieu inerte

Stations d'optimisation (3 à 6 réacteurs)



L'opérationnel – automatisation et robotisation



Collaboration avec la HEIG-VD – Prof M. Kunze



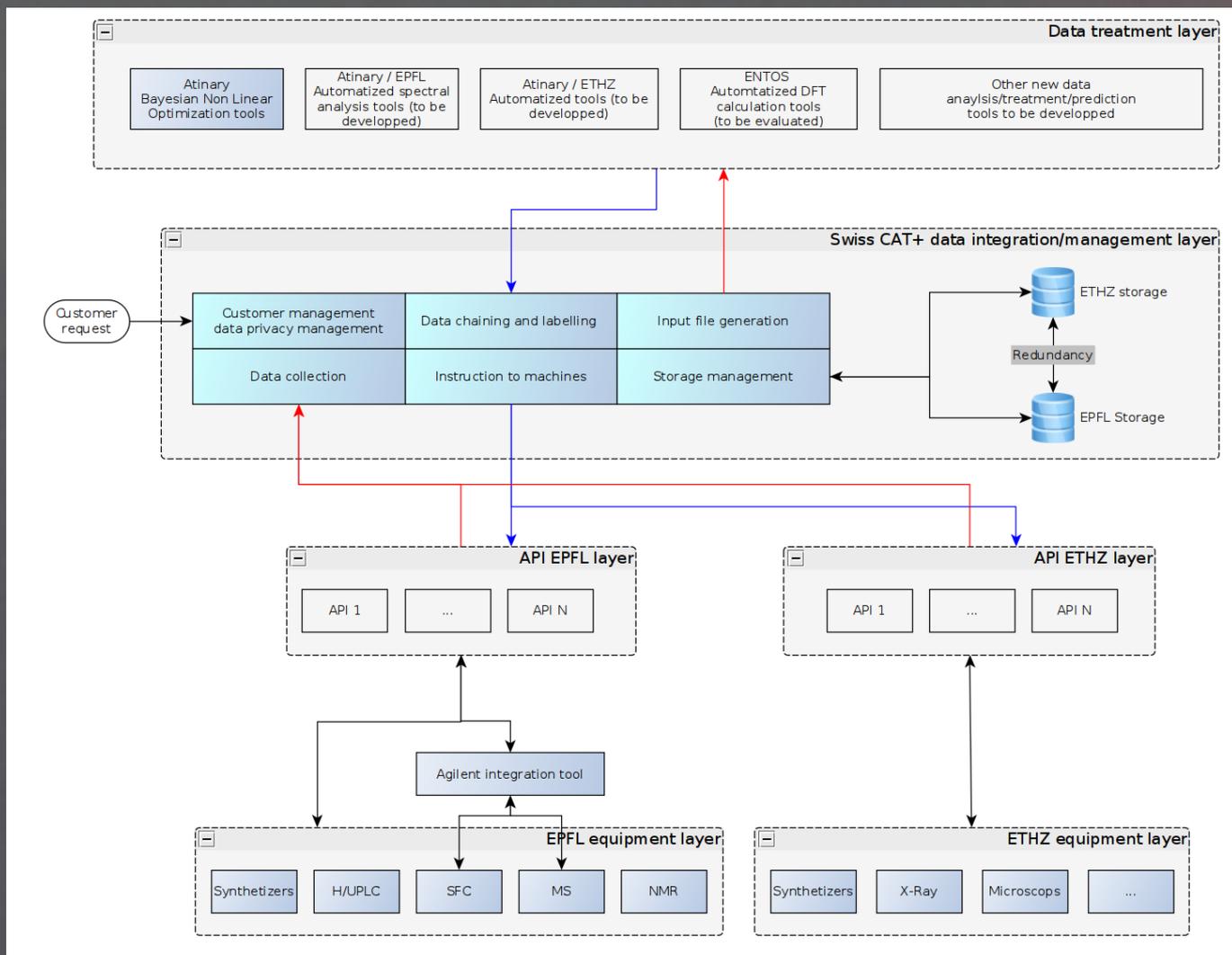
Divers challenges et questions :

- Intelligence embarquée vs intelligence centralisée (IoT, swarms) ?
- Transfert des échantillons entre les machines et postes
- Sampling automatisé de poudres et solides
- Préparation automatisée d'échantillons pour analyse
- Préparation automatisée d'échantillons RMN

La gestion des données – un système en couches



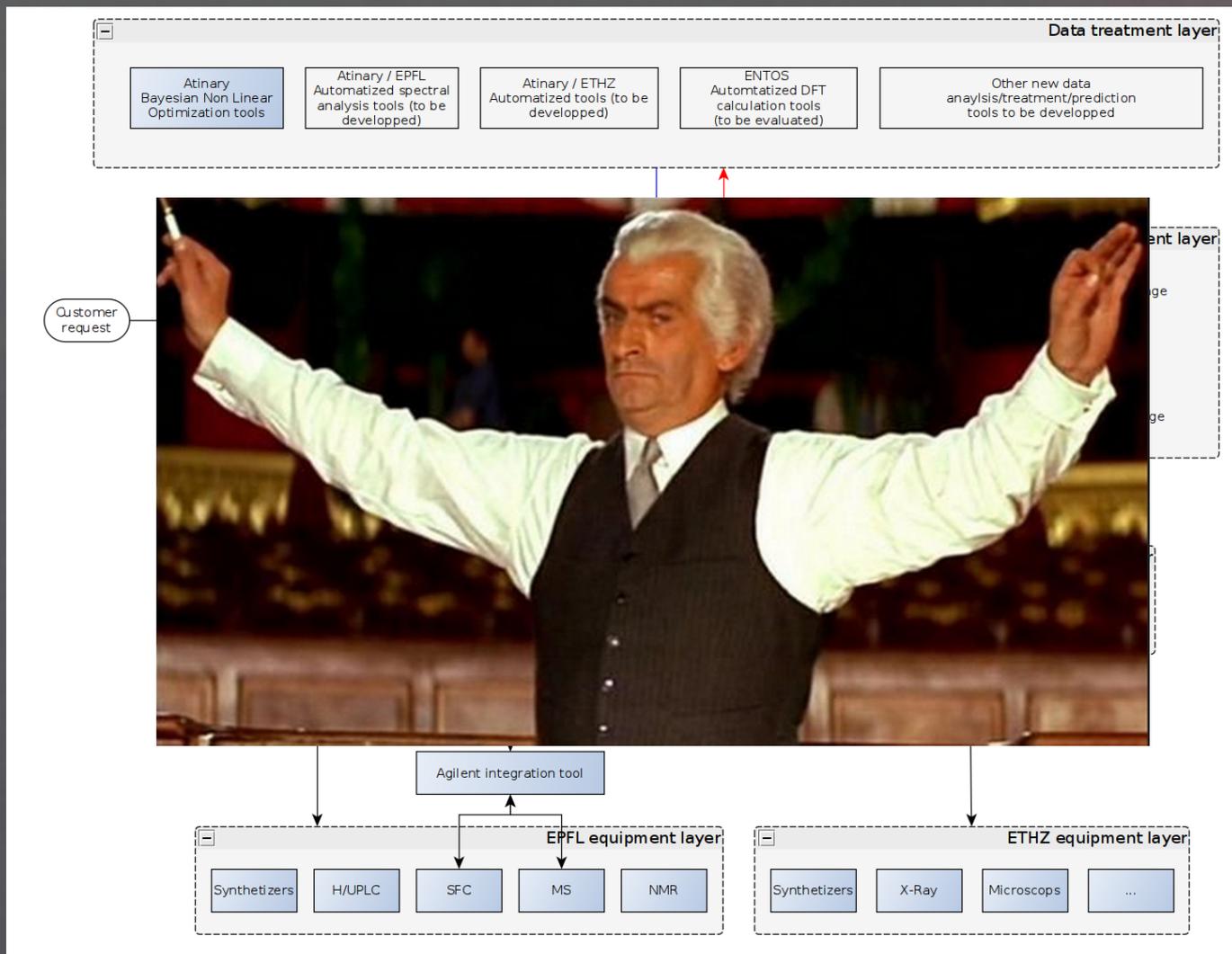
Lab Workflow Management Software
SLIMS



La gestion des données – un système en couches



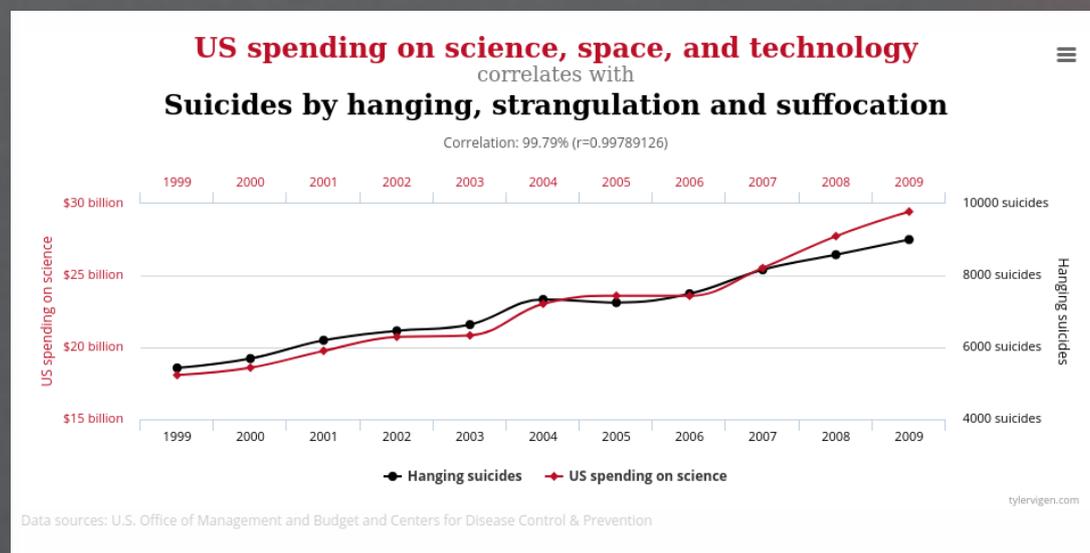
Lab Workflow Management Software
SLIMS



Mais où va-t-on ?

La chimie bénéficiera-t-elle d'un tel niveau de contrôle et de répétabilité ? Tycho Brae & Kepler, CERN

Science déductive plutôt que science inductive ? Corrélation n'est pas causalité !



<https://tylervigen.com/spurious-correlations>

Est-ce le laboratoire de chimie de 2030 ?

Si oui, quelle place pour les chimistes dans cet environnement ?

Si oui, quelle formation pour les chimistes/ingénieurs/laborantins ?

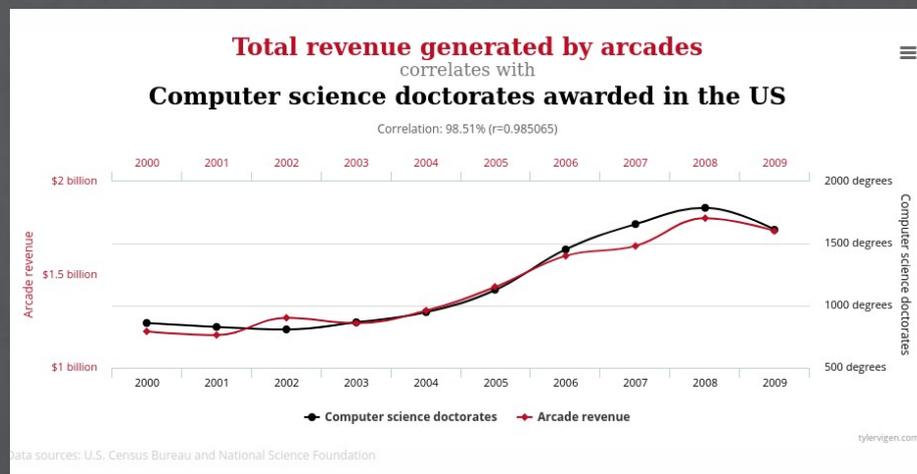
Merci

A tous pour votre attention
 A toute l'équipe Swiss CAT+ pour sa formidable implication
 A l'Institut de chimie, à la Faculté des Sciences de Base et à
 l'Administration centrale de l'EPFL pour leur soutien constant
 A tous nos partenaires académiques et industriels



Open structure → donc nous vous attendons sur site pour des échanges fructueux ou simplement des visites éducatives.

Des questions – remarques – critiques



<https://tylervigen.com/spurious-correlations>

