Rédigé le 14 mars 2024

3 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Analyse chimique

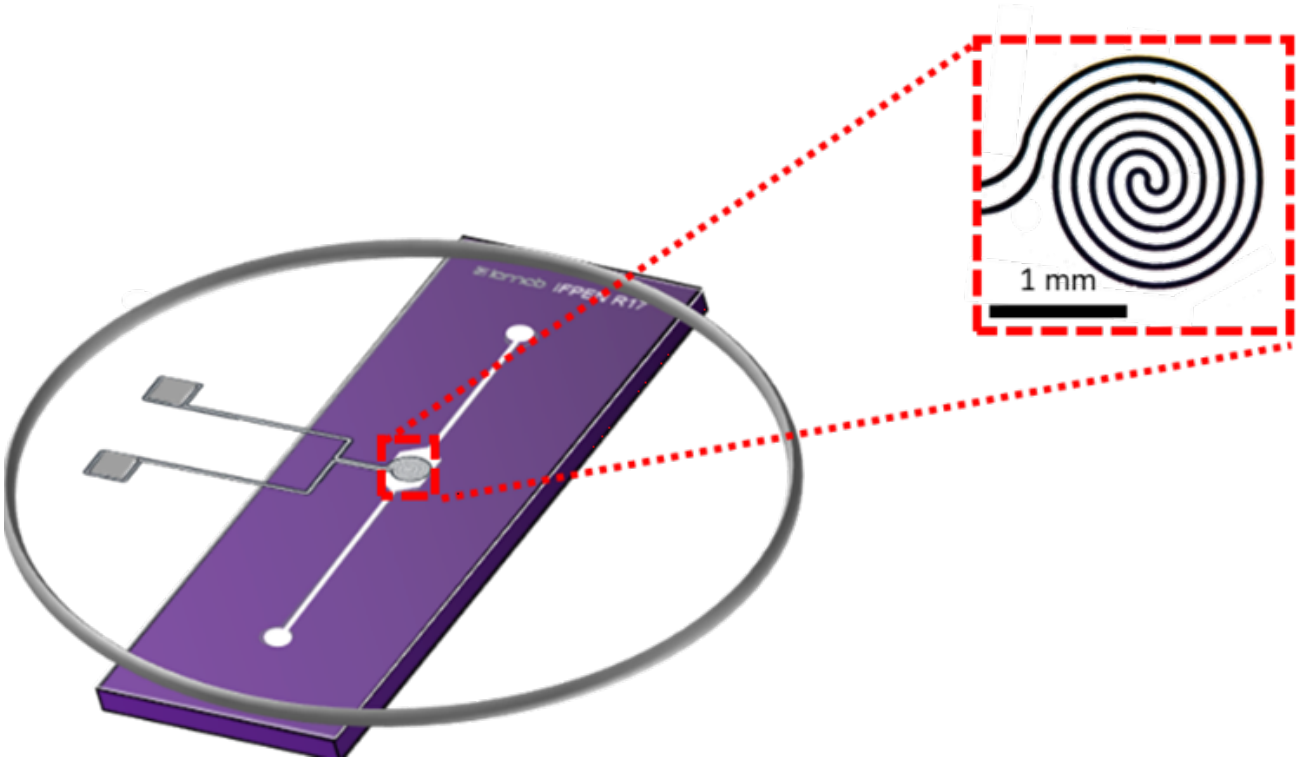
Microfluidique

**La conductivité thermique est une propriété clé pour le dimensionnement de nombreux équipements, comme les échangeurs, qui permettent de transférer de l'énergie thermique d'un fluide caloporteur vers un autre, sans les mélanger. Des travaux de thèse réalisés à IFPEN [1] viennent bousculer les approches classiquement employées à la fois pour la mesure et pour la prédiction de cette propriété.**

## Microfluidique : la voie expérimentale

La microfluidique est une technique qui consiste à étudier le comportement de fluides dans des dispositifs miniaturisés – puces microfluidiques – comportant des canaux de quelques dizaines de micromètres de diamètre. L'intégration de capteurs au sein de ces canaux permet d'accéder à une mesure précise des propriétés des fluides. Grâce à la miniaturisation, mais aussi aux gains de temps et aux réductions de coûts qu'elle engendre, la microfluidique élargit le spectre des possibilités en matière d'expérimentations. C'est notamment le cas pour des applications où l'échantillon liquide est disponible en faible quantité.
Un travail de recherche, de conception et de développement, conduit à IFPEN en collaboration avec l'ICMCB[1], a permis la réalisation d'une puce microfluidique (Figure 1) pour mesurer la conductivité thermique des liquides [2]. Validé sur la base de données disponibles dans la littérature, ce dispositif a ensuite été employé pour générer de nouvelles données de conductivité thermique, notamment pour le 2,5-diméthylfurane, un composé issu de la biomasse pour lequel aucune mesure expérimentale n'avait été rapportée jusqu'alors.

[1] Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux




Dispositif microfluidique. Illustration adaptée de la thèse de Rosa Moreno Jimenez [1].

## Chémoinformatique : la voie prédictive

La chémoinformatique consiste à utiliser des ressources informatiques pour résoudre des problèmes liés à la chimie et, dans une de ses déclinaisons, à recourir à l'intelligence artificielle pour prédire des propriétés à partir de données de référence, qu'elles soient expérimentales ou issues de simulations. La direction Physico-chimie et Mécanique appliquées d'IFPEN a investi depuis plusieurs années dans cette discipline pour les besoins de sa recherche et s'est plus particulièrement intéressée aux algorithmes d'apprentissage automatique. L'application récente de ces outils d'apprentissage à des

données issues de la littérature a ainsi rendu possible la prédiction de la conductivité thermique d'hydrocarbures et d'oxygénés en phase liquide en fonction de la température [3]. Par cette approche, il est donc possible non seulement de reproduire les données expérimentales existantes, mais aussi de prédire le comportement de nouveaux composés au sein de la famille chimique couverte par la base d'apprentissage.

### Microfluidique et chémoinformatique : deux voies convergentes

Disposer de ces deux nouvelles approches est de toute évidence un atout majeur pour (i) d'une part la mesure et (ii) d'autre part la prédiction de la conductivité thermique des fluides. Afin d'accroître les domaines d'applicabilité de l'approche par apprentissage machine (nouveaux composés, autres conditions de température,…) ou encore la robustesse des prédictions, il importe désormais de compléter les bases de données existantes par l'acquisition à la fois massive et ciblée de nouveaux résultats expérimentaux.

### Références :

[1] Thèse de Rosa Moreno Jimenez : Acquisition de données de conductivité thermique par microfluidique et chémoinformatique, soutenue le 19-10-2023 à l'université de Bordeaux
>> https://theses.hal.science/tel-04328466
[2] Moreno Jimenez R., Creton B., Marlière C., Teule-Gay L., Nguyen O., Marre S. (2023) A microfluidic strategy for accessing the thermal conductivity of liquids at different temperatures, Microchemical Journal 193, 109030.
>> https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.109030
[3] Moreno Jimenez R., Creton B., Marre S. (2023) Machine learning-based models for accessing thermal conductivity of liquids at different temperature conditions, SAR and QSAR in Environmental Research 34 (8), 605-617.
>> https://doi.org/10.1080/1062936X.2023.2244410

**Contact scientifique** : Benoit Creton

# VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

La chémoinformatique et ses descripteurs : application à la compatibilité polymères/fluides
Microfluidique et Chémoinformatique : une forte complémentarité pour étudier la compatibilité matériaux/fluides
Microfluidique et chémoinformatique : des voies complémentaires d'accès à la conductivité thermique !
14 mars 2024

Lien vers la page web :