



Nouveau projet ANR *Memobiol* pilote par l'IFP

La modélisation au service de la chimie verte

Rueil-Malmaison, le 9 février 2010 - Le projet MEMOBIOL (Modélisation à l'Echelle MOléculaire pour les BIOraffineries Lignocellulosiques), piloté par l'IFP, sur la modélisation moléculaire appliquée à la biomasse lignocellulosique (résidus de bois, pailles de céréales, déchets forestiers) a été sélectionné par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) dans le cadre de l'appel à projets 2009 "Chimie et Procédés pour le Développement Durable". Aux côtés de l'IFP, le projet rassemble six partenaires, académiques – Armines (École des Mines de Paris CEP/TEP), l'ENSTA-ParisTech (l'École nationale supérieure des techniques avancées), et le LIMHP (Laboratoire d'ingénierie des matériaux et des hautes pressions) - et industriels - Materials Design et ProSim -.

La biomasse lignocellulosique est appelée à jouer un rôle majeur en tant que matière de remplacement dans le secteur de la chimie. Lors de la conception de nouveaux produits chimiques et procédés de fabrication à partir de matière lignocellulosique, la chimie doit disposer d'outils de caractérisation des molécules associées à la transformation de ces bioressources.

MEMOBIOL vise ainsi à développer de nouvelles technologies de modélisation et de calcul permettant de restituer le comportement physico-chimique des molécules issues de la biomasse lignocellulosique. À la différence des hydrocarbures, ces molécules appartiennent à diverses familles de composés oxygénés complexes qui nécessitent des outils de modélisation appropriés.

Le projet a pour objectif de mettre au point différents types d'outils :

- Des outils de modélisation "classique" basés sur l'utilisation du modèle SAFT (Statistical Fluid Associating Theory), sur lequel l'IFP et le LIMHP travaillent en étroite collaboration depuis plusieurs années. Ce modèle sera mis à disposition des industriels dans les outils de calcul commercialisés par la société ProSim.
- Des outils de simulation moléculaire qui reproduisent les interactions entre les atomes afin de prédire les propriétés d'un produit, domaine dans lequel l'IFP a acquis des compétences très larges. Memobiol développera, dans ce cadre, de nouvelles applications pour le code de simulation *Monte Carlo Gibbs*, copropriété de l'IFP, du CNRS et de l'Université Paris Sud. Une capitalisation de ces travaux est envisagée *via* la plateforme MedeA commercialisée par la société Materials Design.

- Enfin, l'ENSTA mènera des travaux visant à évaluer l'approche COSMO-RS. Cette dernière consiste à caractériser le comportement d'un mélange à partir d'une description quantique des molécules qui le composent.

Les modèles ainsi mis au point seront confrontés aux données expérimentales résultant des mesures effectuées par Armines (CEP/TEP) et des données de la littérature.

Les technologies de pointe issues des travaux menés par les partenaires de MEMOBIOL constitueront, pour les industriels, des outils précieux d'aide à la prise de décision dans leur démarche d'ingénierie verte.

Contact presse :

IFP – Anne-Laure de Marignan – Tel. : 01 47 52 62 07 – a-laure.de-marignan@ifp.fr