REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Mise à Jour du Master Professionnalisant

Etablissement	Faculté / Institut	Département
USTHB	Génie Mécanique/Génie des Procédés	Génie de l'Environnement

Domaine	Filière	Spécialité
Science et Technologie	Génie des Procédés	Sciences et technologie du médicament

Arrêté : 992 Date de la publication 11/09/2021

Année universitaire : 2025-2026

II – Fiches d'organisation semestrielles des enseignements de la spécialité Sciences et Technologie des Médicaments (STM)

Les matières suivantes sont communes à tous les masters (y compris les masters professionnalisant):

- ✓ **Programmation avancée en python**
- ✓ **Eléments d'Intelligence artificielle appliquée**
- ✓ **Respect des normes et des règles d'éthique et d'intégrité**
- ✓ **Reserve engineering**
- ✓ **Recherche documentaire et conception de mémoire**

Semestre 1

Unité d'enseignement	Matières	Crédits	Coefficient	Volume horaire hebdomadaire			Volume Horaire Semestriel (15 semaines)	Travail Complémentaire en Consultation (15 semaines)	Mode d'évaluation	
	Intitulé			**Cours**	**TD**	**TP**			**Contrôle Continu**	**Examen**
UE Fondamentale Code : UEF 1.1.1 Crédits : Coefficients :	Matière 1 Structure- des Fonction Biomolécules	4	2	1h30	1h30		45h00	55h	40%	60%
	Matière 2 Stratégie de synthèse	4	2	1h30	1h30		45h00	55h	40%	60%
UE Fondamentale Code : UEF 1.1.2 Crédits : Coefficients :	Matière 3 Ingénierie des formes pharmaceutiques solides	5	2	1h30	1h30	1h30	67h30	82h30	40%	60%
	Matière 4 Analyse et Contrôle des médicaments	4	2	1h30		1h00	37h30	55h	40%	60%
UE Méthodologique Code : UEM 1.1 Crédits : Coefficients :	Matière 1 Expérimentation animale	4	2	1h30		1h00	37h30	55h	40%	60%
	Matière 2 Modélisation Moléculaire appliquée aux systèmes biologiques	4	2	1h30		1h30	45h00	55h	40%	60%
	Matière 3 Opérations unitaires	1	1			1h00	15h00	2h30		100%
	Matière 4 Méthodes d'analyse thermique	1	1	1h30			22h30	2h30		100%
	Programmation avancée en Python	2	2	1h30		1h30	45h00	55h00	40%	60%
UE Découverte Code : UED 1.1 Crédits : 1 Coefficients : 1	Matière 1 Métrologie et maintenance industrielle	1	1		1h30		22h30	02h30		100%
Total semestre 1		**30**	**17**	**12h00**	**6h00**	**7h30**	**382h30**			

Semestre 2

Unité d'enseignement	Matières	Crédits	Coefficient	Volume horaire hebdomadaire			Volume Horaire Semestriel (15 semaines)	Travail Complémentaire en Consultation (15 semaines)	Mode d'évaluation	
	Intitulé			**Cours**	**TD**	**TP**			**Contrôle Continu**	**Examen**
UE Fondamentale Code : UEF 1.2.1 Crédits : Coefficients :	Matière 1 Génie cellulaire et moléculaire	4	2	1h30	1h30		45h	55h	40%	60%
	Matière 2 Ingénierie des protéines recombinantes et production des vaccins	4	2	1h30	1h30		45h	55h	40%	60%
UE Fondamentale Code : UEF 1.2.2 Crédits : Coefficients :	Matière 3 Méthodes spectrales et séparatives	5	2	1h30	1h30	1h30	67h30	82h30	40%	60%
	Matière 4 Ingénierie des formes pharmaceutiques liquides et semi solides	4	2	1h30		1h30	45h	55h	40%	60%
UE Méthodologique Code : UEM 1.2 Crédits : Coefficients :	Matière 1 Production d'interféron, de cytokines, facteurs de croissances et antagonistes	4	2	1h30		1h30	45h00	55h	40%	60%
	Matière 2 Traitement des effluents et de déchets des industries pharmaceutiques	4	2			1h30	22h30	55h		100%
	Matière3 Production d'eau pharmaceutique et Traitement d'air	1	1		1h30		22h30	10h		100%
	Matière 4 Les Bonnes Pratiques de Fabrication	1	1	1h30			22h30	10h		100%
UE Transversale Code : UET 1.2 Crédits : 3 Coefficients : 3	Eléments d'IA appliquée	2	2	1h30	1h30		45h00	5h00	40%	60%
	Respect des normes et des règles d'éthique et d'intégrité	1	1	1h30			22h30	02h30		100%
Total semestre 2		**30**	**17**	**12h00**	**6h00**	**7h30**	**382h30**			

Semestre 3

Unité d'enseignement	Matières	Crédits	Coefficient	Volume horaire hebdomadaire			Volume Horaire Semestriel (15 semaines)	Travail Complémentaire en Consultation (15 semaines)	Mode d'évaluation	
	Intitulé			**Cours**	**TD**	**TP**			**Contrôle Continu**	**Examen**
UE Fondamentale Code : UEF 2.1.1 Crédits : Coefficients :	Matière 1 Stabilité et Biopharmacie	4	3	1h30		1h30	45h00	55h	40%	60%
	Matière 2 : Nouvelles formes pharmaceutiques	4	3	1h30	1h30		45h00	82h30	40%	60%
UE Fondamentale Code : UEF 2.1.2 Crédits : Coefficients :	Matière 4 Pharmacognosie et production de médicaments d'origine naturelle	4	2	1h30	1h30		45h00	55h	40%	60%
	Matière 4Microbiologie appliquée	4	1	1h30		1h30	45h00	55h	40%	60%
UE Méthodologique Code : UEM 2.1 Crédits : Coefficients :	Matière 1 Statistiques	4	1	1h30		1h30	45h00	55h	40%	60%
	Matière 2 Plans d'expériences	4	2		1h30	1h30	45h00	55h	40%	60%
	Matière 3 Chimie thérapeutique	2	1		1h30		22h30	10h		100%
	Matière 4 Hygiène Sécurité Environnement (HSE)	1	1	1h30			22h30	10h		100%
UE Transversale Code : UET 2.1 Crédits : 3 Coefficients :3	Reserve engineering	2	2	1h30	1h30 Atelier		45h00	5h00	40%	60%
	Recherche documentaire et conception de mémoire	1	1	1h30			22h30	02h30		100%
Total semestre 3		**30**	**17**	**12h00**	**6h00**	**7h30**	**382h30**			

Contenus des matières mises à jour

Semestre: S1
Unité d'enseignement: UET 1.1.1
Matière : Programmation avancée en Python
VHS: 45h00 (Cours 1h30, TP 1h30)
Crédits: 2
Coefficient: 2

Objectifs de la matière :

Compétences visées :

- Utilisation des outils informatiques pour l'acquisition, le traitement, la production et la diffusion de l'information
- Compétences en Python et gestion de projets,
- Compétences en automatisation et visualisation de données.

Objectifs :

- Approfondir la maîtrise du langage Python et initier les étudiants aux bases de l'analyse de données et de l'intelligence artificielle.
- Acquérir les bases de solides en informatique.
- Apprendre à programmer en Python, Excel
- Maitriser l'automatisation de tâches
- Maitriser un logiciel de gestion de projets

Matériels nécessaires :

- Un ordinateur avec Python installé,
- Bibliothèques Python : NumPy, Pandas, Scikit-learn, Matplotlib, os.listdir, os.path.exists, os.mkdir, os.rmdir, Matplotlib, Seaborn, Plitly , Request, Beautiful Soup, Tkinter, PyQT, …
- Tensorflow, PyTorch.

Prérequis : Programmation Python.

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Rappels sur la programmation en Python (02 Semaines)

1. Introduction : Concepts de base en informatique et outils numériques, installation de Python.
2. Présentation de la notion de système d'exploitation : Roles, types (Linux, Woindows , ..) Gestions des priorités,
3. Présentations des réseaux informatiques (Principe, Adresse IP, DNS, internet, …)
4. Programmation de base : Mode interactif et mode script, Variables, types de données, opérateurs. Structures conditionnelles et boucles (if, for, while).

5. Fonctions et éléments essentiels : Fonctions prédéfinies et création de fonctions. Modules standards (math, random). Chaînes de caractères, listes, manipulation de base des données.
6. Les Fichiers , Listes, Tuples, Dictionnaires,
7. Exercices :
   - Exercices d'apprentissage de Python
   - Exercices d'utilisation des bibliothèques vus au cours (Math, Random, NumPy, Pandas,…)
   - …

Chapitre 2 : Programmation et automatisation (04 semaines)

1. Principes d'Automatisation de tâches
   - Bibliothèques Python pour l'automatisation :
     - ✓ Pandas et NumPy.
     - ✓ Os, shutil : manipulation de fichiers et dossiers
     - ✓ Openpyxl ou pandas : travail avec des fichiers Excel ou CSV
   - Définitions et exemples d'automatisation (envoi de mails,…)
2. Manipulation de fichiers avec Python :
   - Utiliser les librairies pour :
     - ✓ Parcourir un dossier (os.listdir)
     - ✓ Vérifier l'existence d'un fichier ou dossier (os.path.exists)
     - ✓ Créer ou supprimer des dossiers (os.mkdir, os.rmdir)
     - ✓ Visualiser des données : Matplotlib, Seaborn, Plitly
     - ✓ Request pour réagir avec des Interface de Programmation d'Application (API)
     - ✓ Beautiful Soup pour le Scraping de données
     - ✓ Tkinter, PyQT pour visualiser des données graphiques
   - Copier ou déplacer des fichiers avec shutil…
   - Recherche, tri et génération de rapports simples.
   - Sérialisation et Désérialisation (Utilisation du module pickle).
   - Sérialisation d'objets et traitement de fichiers volumineux (streaming).
   - ….
3. **Exercices** :
   - Utilisation de openpyxl et pandas pour lire, modifier et écrire des fichiers Excel ou CSV pour :
     - ✓ Créer des rapports automatiques
     - ✓ Extraire automatiquement des données
     - ✓ ….

- Ecriture de scripts pour :
  - ✓ traiter des fichiers textes (recherche, tri)
  - ✓ automatiser des calculs techniques
  - ✓ gérer des rapports simples (PDF, Excel)
  - ✓ ….
- Algorithmes de tri, de recherche et de tri par insertion
- Implémenter une fonction de recherche dans une liste.
- Opération sur les fichiers
- Navigation sécurisée (configuration de réseaux simples, gestion des mots de passe)
- ….

Chapitre 3 : Apprentissage avancé d'Excel (02 semaines)

1. Principes des macros et création d'une macro simple,
2. Tableaux croisés dynamiques,
3. Histogrammes,
4. Diagrammes en barres,
5. Araignée,
6. Etc.
7. **Exercices** Excel …

Chapitre 4 : Apprentissage de GanttProject (02 semaines)

1. Introduction à la gestion de projets :
   - Qu'est-ce qu'un projet ?
   - Quels sont les enjeux de gestion d'un projet ?
   - Interface de GanttProject
2. Les tâches (création, modification ,organisation)
3. Gestion du temps (dates de début ou de fin de projet)
4. Gestion des ressources
5. **Exercices** sur Gantt Project

Chapitre 5 : Programmation orientée objet avancée (03 semaines)

1. Organisation du code :
   - Fonctions personnalisées, paramètres, valeur de retour.
   - Modules, importations et packages.
2. Structures de données complexes :
   - Listes, tuples et dictionnaires : création, modification, suppression, parcours.

3. Concepts fondamentaux de la Programmation orientée objet (POO) :
   - Classes, objets, attributs et méthodes.
   - Attributs publics, privés et protégés.
4. Méthodes spéciales :
   - **init**, **str**, **repr**, **len**.
5. Concepts avancés :
   - Encapsulation, abstraction, héritage, polymorphisme.
   - Héritage avancé, décorateurs, design patterns, métaclasses.
6. **Exercices**

Chapitre 6 : Introduction aux données pour l'IA (02 semaines)

1. Introduction aux Datasets courants en IA :
   - Iris, MNIST, CIFAR-10, Boston Housing, ImageNet.
2. Prétraitement des données pour le Machine Learning:
   - Nettoyage, normalisation, encodage, séparation des données.
   - Validation croisée (cross-validation).
3. Techniques de Feature Engineering :
   - Sélection, création de caractéristiques, réduction de dimension.
4. Bibliothèques essentielles pour le développement des modèles IA:
   - scikit-learn, TensorFlow, Keras, PyTorch
5. **Exercices**

Travaux pratiques :

TP 01 : Maîtriser les bases de la programmation en Python

(Structures de contrôle, types, boucles, fonctions simples)

1. Initiation
2. Lire et traiter des fichiers textes
3. Gérer des rapports simples (PDF, Excel)

TP 02 :

Elaborer un cahier de charges d'un mini projet d'automatisation de tâches avec Python consistant à identifier et à envoyer automatiquement des rapports par email avec Python :

1. Charger les données depuis un fichier (ex : mesures expérimentales),
2. Effectuer des statistiques simples sur les données (moyenne, écart-type avec interprétation),
3. Générer un graphique,

4. Envoi du résultat avec Python.

TP 03 :

1. Programmation ex Excel du tableau de bord vu en cours
2. Création de tableaux Excel automatisés
3. Macros simples,
4. Formules conditionnelles,
5. Recherche V.

TP 04 :

Organiser une réunion en Ganttproject

1. Créer un nouveau projet :
    - Nom du projet : « Réunion …..
    - Date de début : Date et heure de la réunion
    - Durée estimée : durée totale de la réunion
2. Définition des tâches
    - Points à l'ordre du jour (chaque point de l'ordre du jour devient une tâche)
    - Sous-taches : Si un point est composé, créer alors les sous-tâches correspondantes
    - Tâches initiales et finales (par exemple : « Accueil de participants », « clôture de la réunion »)
3. Définition des ressources :
    - Participants (chaque participant est une ressource)
    - Matériel (ordinateur, datashow…)
4. Estimation des durées :
    - Durée de chaque point : temps nécessaire pour chaque point de l'ordre du jour
    - Temps de transition d'un point à l'autre
5. Création du diagramme de Gantt :
    - Visualiser l'ordre du jour
    - Identifier les points clés
6. Suivre l'avancement en temps réel (projection du Diagramme de Gantt)

TP 05 :Structures avancées et organisation du code

(Fonctions personnalisées, dictionnaires, modules et organisation modulaire

TP 06 :Programmation orientée objet avancée en Python

(Encapsulation, héritage, méthodes spéciales, design patterns simples)

TP 07 : Manipulation de fichiers et analyse de données

(Lecture/écriture de fichiers, traitement de texte, introduction à Pandas et NumPy)

TP 08 : Préparation et traitement de données pour l'intelligence artificielle

(Chargement de datasets IA, nettoyage, transformation, sélection de caractéristiques)

Projet final

Titre : Analyse et visualisation d'un jeu de données + modèle prédictif simple

Compétences mobilisées : Lecture de données, POO, structures avancées, Pandas, Scikit-learn. **(Présentation orale + rapport écrit).**

Mode d'évaluation :

examen 60% , CC=40%

Bibliographie

[1] . E.Schultz et M.Bussonnier (2020) : Python pour les SHS. Introduction à la programmation de données. Presses Universitaires de Rennes.

[2] . C.Paroissin, (2021) : Pratique de la data science avec R : arranger, visualiser, analyser et présenter des données. Paris : Ellipses, DL 2021.

[3] . S.Balech et C.Benavent : NLP texte minig V4.0, (Paris Dauphine – 12/2019) : lien : https://www.researchgate.net/publication/337744581_NLP_text_mining_V40_-_une_introduction_-_cours_programme_doctoral

[4] . Allen B. Downey Think Python: How to Think Like a Computer Scientist, O'Reilly Media, 2015;

[5] . Ramalho, L.. Fluent Python. " O'Reilly Media, Inc.", 2022;

[6] . Swinnen, G.. Apprendre à programmer avec Python 3. Editions Eyrolles, 2012;

[7] . Matthes, E. Python crash course: A hands-on, project-based introduction to programming. no starch press, 2019

[8] . Cyrille, H. (2018). Apprendre à programmer avec Python 3. Eyrolles, 6ème édition. ISBN: 978-2212675214

[9] . Daniel, I. (2024). Apprendre à coder en Python, J'ai lu

[10] . Nicolas, B. (2024). Python, du grand débutant à la programmation objet Cours et exercices corrigés, 3eme édition, Ellipses

[11] . Ludivine, C. (2024). Selenium Maîtrisez vos tests fonctionnels avec Python, Eni

Ressources en ligne :

- Documentation officielle Python : docs.python.org
- Exercices Python sur Codecademy : codecademy.com/learn/learn-python-3
- W3Schools PythTutorial : w3schools.com/python/

Semestre: S2
Unité d'enseignement: 1.2.1
Matière : Eléments d'intelligence artificielle appliquée
VHS: 45h00 (Cours 1h30, TP 1h30)
Crédits: 2
Coefficient: 2

Compétences visées :

- Identifier les opportunités de l'intelligence artificielle en sciences de l'ingénieur
- Comprendre les implications éthiques de l'IA et les bonnes pratiques de son utilisation.
- Capacité à utiliser les techniques de l'IA dans la résolution de problèmes

Objectifs :

- Maitrise des algorithmes IA
- Initiation aux concepts, outils et applications fondamentales de l'intelligence artificielle moderne, en mettant l'accent sur la pratique avec Python et ses bibliothèques.
- Approfondir le langage Python,
- Comprendre les approches de l'IA dans la résolution de problèmes,

Prérequis :
Programmation avancée Python
Matériels nécessaires :

- Un ordinateur avec Python installé,
- Bibliothèques Python : NumPy, Pandas, Scikit-learn, Matplotlib, os.listdir, os.path.exists, os.mkdir, os.rmdir, Matplotlib, Seaborn, Plitly , Request, Beautiful Soup, Tkinter, PyQT, …
- Tensorflow, PyTorch, …

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction à l'intelligence artificielle l'IA (01 semaine)

1. Définitions et champs d'application de l'IA.
2. Évolution historique de l'IA.
3. Introduction aux grands domaines :
    - **Apprentissage automatqiue (Machine Learning)**
    - **Apprentissage profound (Deep Learning)**

Chapitre 2 : Mathématiques de base pour l'IA (01 semaine)

1. **Algèbre linéaire** : vecteurs, matrices, produits, normes.
2. **Probabilités & statistiques** :
   - **Variables**, espérance, variance.
   - Lois usuelles : normale, binomiale, uniforme.
3. **Régression linéaire simple** :
   - Formulation, coût, optimisation.
   - Mise en œuvre avec **Scikit-learn**.
4. **Exercices :**
   - Manipulation de matrices avec la bibliothèque NumPy (Python)
   - Exercice sur la régression linéaire (utiliser une bibliothèque Python comme Scikit-learn par exemple)
   - Expliquer la bibliothèque Matplotlib (Python)
   - …

Chapitre 3 : Apprentissage automatqiue (Machine Learning) (03 semaines)

1. Concepts clés : Données, Modèles, features, étiquettes, généralisation.
2. Phases d'un pipeline d'apprentissage : entraînement, validation, test.
3. Types d'apprentissage :
   - Supervisé
   - **Non** supervisé
   - **Par** renforcement *(aperçu)*
4. **Exercices :**
   - Approfondir les notions vues au cours
   - ….

Chapitre 4 : Classification supervisée (3 semaines)

1. Principe d'entrainement de modèle de classification simple :
2. Les modèles et algorithmes :
   - SVM (Support Vector Machine)
   - Arbres de décisions
3. Évaluation de performance :
   - Matrice de confusion, précision, rappel, F1-score.
5. **Exercices :**
   - Expliquer comment utiliser Scikit-learn ?

- Comparaison de plusieurs modèles sur un dataset
- ….

Chapitre 5 : Apprentissage non supervisé

1. Notion de clustering.
2. Algorithmes :
   - **K-means**
   - DBSCAN(Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise)
3. Visualisation 2D et interprétation des résultats.
4. **Exercices :**
   - Expliquer comment utiliser un algorithme de clustering sur un Dataset
   - Expliquer comment visualiser les clusters.
   - ….

Chapitre 6 : Les réseaux de neurones

1. Architecture d'un réseau de neurones :
   - Perception,
   - Couches et couches caches, poids, biais.
   - Fonction d'activation : ReLU, Sigmoïde, Softmax, ….
   - Exercices d'applications
2. Introduction au **Deep Learning** :
   - Notion de couches profondes.
   - Introduction au réseaux convolutifs (CNN)
3. **Exercices:**
   - Expliquer Tensorflow et PyTorch
   - Analyser un Dataset de texte et prédire des sentiments
   - ….

Chapitre 7 :Mini projet (travail personnel encadré en dehors des cours) :

Création d'un modèle complet de classification ou clustering, avec prétraitement, entraînement et visualisation ; choisir et traiter un projet du début jusque la fin parmi (à distribuer au début du semestre) :

- Reconnaissance des caractères manuscrits
- Prédiction des catastrophes naturelles
- Développer un Chatbot capable de répondre aux questions fréquentes d'une entreprise, de manière naturelle.
- Développer un système capable de distinguer les sons normaux d'une machine de ceux indiquant une anomalie (roulement défectueux, vibration excessive, etc.)

- Développer un système (mini IA) capable d'analyser les sentiments exprimés dans les publications sur réseaux sociaux à propos d'un produit, une marque ou un évènement.
- …

Travaux pratiques :

TP 01 : Initialisation
TP 02 :

- Implanter une régression simple avec Scikit-learn **visualisationavec Matplotlib**(par exemple)
- Visualiser les résultats avec Matplotlib
- …

TP 03 :

- **Pipeline de machine learning et séparation des données**
- Approfondir es notions vues au cours

TP 04 :

- Utilisation Scikit-learn pour entrainer un modèle de classification simple
- …….

TP 05 :

- Implanter un algorithme de clustering sur un Dataset
- Visualiser les clusters **: Clustering non supervisé (K-means, DBSCAN).**
- ….

TP 06 :

- Construire un réseau de neurones simple avec TensorFlow ou PyTorch ou keras
- Construire un CNN simple pour classifier des images (exemple : Dataset MINIST)
- …

Mode d'évaluation :

examen 60% , CC=40%

Bibliographie :

- Ganascia, J.Gabriel (2024) : l'IA expliquée aux humains. Paris France- Edition le Seuil.
- Anglais, Lise, Dilhac, Antione, Dratwa, Jim et al. (2023) : L'éthique au coeur de l'IA. Quebec Obvia.
- J.Robert (2024) : Natural Language Processing (NLP) : définition et principes – Datasciences. Lien : https://datascientest.com/introduction-au-nlp-natural-language-processing
- Qu'est-ce que le traitement du langage naturel. Lien : https://aws.amazon.com/fr/what-is/nlp/

- M.Journe : Eléments de Mathématiques discrètes – Ellipses
- F.Challet : L'apprentisage profond avec Python – Eyrolles
- H.Bersini (2024) : L'intelligence artificielle en pratique avec Python – Eyrolles
- B.Prieur (2024) : Traitement automatique du langage naturel avec Python – Eyrolles
- V.Mathivet (2024) : Implémentation en Python avec Scikit-learn – Eyrolles
- G.Dubertret (2023) : Initiation à la cryptographie avec Python – Eyrolles
- S.Chazallet (2023) : Python 3 – Les fondamentaux du langage - Eyrolles
- H.Belhadef, I.Djemal : Méthode TALN – Cours de l'unievrsité de Msila - Algérie

Semestre : 3
Unité d'enseignement : UET 2.1
Matière 2 : Chemical reverse engineering

VHS : 67 h30 (Cours : 1h30, TD et ou TP : 1h30)
Crédits : 2
Coefficient : 2

Objectifs de l'enseignement :

Former l'étudiant en :

- Intelligence concurrentielle
- Démarche qualité (contrôle qualité d'un produit auprès d'un fournisseur permettant une traçabilité, une analyse de conformité par exemple)
- Compréhension/anticipation de divers phénomènes (vieillissement prématuré, réactivité du produit, relation structure-propriété...).
- Substitution de matières premières (pénurie ou changement stratégique)
- Optimisation des produits
- Obtention de données pour la conformité réglementaire
- Protection de la propriété intellectuelle (vérification de la contrefaçon de brevets, de la concurrence déloyale, etc.)

Connaissances préalables recommandées :

Méthodes physicochimiques d'analyse (spectroscopie, microscopie, analyse thermique, etc….)

Contenu de la matière :

Chapitre1 Introduction à la rétro-ingénierie chimique

1.1 Historique, enjeux légaux et éthiques du RE,

- Définitions et champs d'application : Approches (matériels, logiciels, procédés…)
- Objectifs de conception du produit, contraintes qui ont pu influencer le produit, Pour quel marché le produit a-t-il été créé ? Comment le produit fonctionne-t-il ?
- Comment pensons-nous qu'il fonctionne ? Comment répond-il à l'objectif global de la conception ? Pourquoi a-t-il été conçu de cette manière ?

1.2 Méthodes et utilisation

- Chromatographie : séparer et identifier les différents composants d'un mélange
- Spectroscopie : identifier et quantifier les liaisons chimiques et les éléments présents dans un échantillon
- Microscopie : examiner la microstructure d'un échantillon
- Analyse thermique : étudier les propriétés thermiques d'un échantillon

- Rhéologie : étudier les propriétés mécaniques d'un échantillon en fonction du temps et de la température

1.3 Domaines d'utilisation

- Industries des polymères, peintures, encres, poudres, céramiques, composites, emballage
- Industries pharmaceutiques et médicaments
- Industries alimentaires
- Industries cosmétiques
- Industries pétrochimiques

1.4 Cas où la rétro-ingénierie n'est pas possible

- Formulations complexes
- Manque d'équipement
- Restrictions légales
- Problèmes de sécurité
- Dégradation

Chapitre2 Méthodologie générale

2.1 Pyramide inversée

2.1.1 Analyse globale du produit : Evaluation documentaire du mélange à déformuler,

2.1.2 Analyse superficielle du mélange : solubilité, réactivité chimique, présence de charge, nombre de composés formant le mélange, taille des molécules

2.1.3 Analyse spécifique de chacun des composés à déformuler : isoler les différentes espèces puis les identifier et les qualifier par des techniques de chromatographie, RMN, analyse élémentaire (MEB, EDX…)

2.1.4 Quantification des espèces isolées (chromatographies, RMN, Techniques gravimétriques)

2.1.5 Exemples d'applications : Ingénierie inverse de résines époxy, résines formo-phénoliques, peintures, shampooings, dispositifs médicaux, etc.

Chapitre 3 Processus de rétroingénierie

3.1 Hypothèse sur le procédé de fabrication

Reconstitution des étapes de fabrication à partir de la composition chimique :

- Température, pression, catalyseurs utilisés.
- Ordre d'ajout des réactifs.
- Conditions de réaction et purification.

3.2 Modélisation et simulation

- Utilisation de logiciels de simulation chimique (Aspen Plus, ChemCAD, etc.) pour valider les hypothèses.
- Évaluation des équilibres thermodynamiques et cinétiques.

3.3 Reproduction expérimentale

- Réalisation de tests en laboratoire pour vérifier les hypothèses de formulation ou de procédé.
- Ajustement des paramètres en fonction des résultats obtenus.

3.4 Optimisation

- Amélioration du procédé (rendement, coût, impact environnemental).
- Recherche de formulations équivalentes ou meilleures (génériques, alternatives brevetables, etc.).

Chapitre 4 Techniques de développement de formes pharmaceutiques génériques

4.1. Recherche et formulation :

4.2. Essais de bioéquivalence :

Bioéquivalence des médicaments génériques avec le médicament de référence,

4.3. Études toxicologiques, pharmacologiques et cliniques :

4.4. Demande d'autorisation de mise sur le marché (AMM) :

4.5. Contrôle de la qualité :

Chapitre 5 Techniques de développement de polymères

5.1 Acquisition et préparation de l'échantillon

- Acquisition : matière première ou prototype

Préparation: nettoyage, séchage, préparation de l'échantillon pour analyse selon la technique d'analyse utilisée

5.2. Analyses et Caractérisation (physiques et chimiques)

(microscopie, spectroscopie (e.g., FTIR, NMR), analyse thermique, et autres méthodes de détermination la structure la composition et propriétés des polymères.

5.3. Formulation et Reconstruction:

- Appréhender la composition :
- Reproduire le processus :

5.4. Validation et optimisation :

- Essais et validation :
- Optimisation :
- Production : (produit original, ou développer un nouveau)

5.5. Avantages de l'ingénierie inverse dans le développement des polymères :

- Reproduction de produits :

- Amélioration des produits existants :
- Développement de nouveaux produits :
- Réduction des coûts :
- Compréhension des produits concurrents :

Chapitre 6 Rétro ingénierie d'un détergent liquide commercial

Étape 1 : Produit existant (Échantillonnage**) : Prélèvement du produit détergent liquide à analyser**

Étape 2 : Analyse physico-chimique :

- Identification des tensioactifs
- Identification des polymères ou additifs.

Étape 3 : Composants identifiés :

- **Dosage des composants**

Étape 4 : Hypothèse sur la formulation

Étape 5 : Reconstitution du procédé

Reconstitution du processus probable :

1. Mélange à froid
2. Solubilisation
3. Ajustement du pH
4. Ajout de conservateurs et parfum

Étape 6 : Essais en labo

Reproduire le mélange avec les proportions estimées. Ajuster selon viscosité, mousse, pH, stabilité.

Étape 7 : Ajustements et tests

Évaluer les performances : pouvoir nettoyant, stabilité, coût.

Étape 8 : Formulation finale

Optimisation Ajouter des améliorations : agents biodégradables, meilleur parfum, réduction des coûts.

Remarques :

- Dans le cas d'un produit formulé (comme un détergent), la **séparation et l'identification des composants** est essentielle.
- Certaines substances comme les parfums ou les agents conservateurs peuvent être présents à **très faible concentration**, mais jouer un **rôle clé** dans la performance ou la perception du produit.

Chapitre 7 Analyse d'une huile moteur multigrade 5W-30

Objectif : Comprendre la composition chimique et les propriétés techniques d'une huile moteur 5W-30 d'un concurrent (ex. : Total, Mobil, Shell), afin de :

- ***Reproduire un lubrifiant équivalent,***
- ***Identifier les additifs utilisés,***
- ***Développer un produit de performance comparable ou améliorée***.

7.1 Caractéristiques d'une huile moteur à analyser

- **Grade SAE** : 5W-30 (bonne fluidité à froid + protection à chaud)
- **Spécifications** : API SP, ACEA C3
- **Utilisation** : moteurs essence et diesel récents, avec FAP ou catalyseur

7.2 Étapes de rétroingénierie

1. Préparation de l'échantillon

- Échantillon frais (neuf) prélevé dans un bidon scellé.
- Analyse également possible sur huile usagée pour étudier les performances en conditions réelles.

2. Analyses physico-chimiques

AnalyseViscosité cinématique
Indice de viscosité (VI)
Point d'éclair / Point de congélation
Analyses Spectrométriques (ICP-AES, **FTIR / GC-MS** …)

3. Composition typique identifiée

Composant
Base API Groupe III ou IV
ZDDP (zinc dialkyldithiophosphate)
Calcium / Magnésium
Phosphore
Polymères modificateurs de viscosité
Dispersants (borés, succinimides)
Inhibiteurs de corrosion

4. Reconstitution en formulation

5. Tests de validation

- Essais tribologiques (test 4 billes, ASTM D4172)
- Simulation moteur (sequence IVA, VG, etc.)
- Tests sur banc moteur (durabilité, consommation)
- Compatibilité avec catalyseurs, filtres à particules

Résultat final

- Formulation d'une huile moteur 5W-30 respectant les normes API/ACEA.
- Possibilité de formuler une **alternative low SAPS** pour moteurs récents.
- Réduction des cendres sulfatées et adaptation aux véhicules Euro 6/7.

Remarques

- La rétroingénierie d'une huile moteur nécessite une **connaissance poussée en tribologie, chimie organique et normes techniques**.
- L'utilisation de **packages d'additifs industriels** permet de simplifier la formulation, mais leur nature exacte est souvent **confidentielle**.
- Les **brevets** et **exigences réglementaires** (REACH, normes constructeurs) doivent être respectés.

Mode d'évaluation :

- TP techniques 30 %
- Mini-projet de rétro-ingénierie (rapport + soutenance) 40 %,
- Examen final (QCM + étude de cas) 30 examen 60% et CC TP : 40%

Références bibliographiques :

- **Jacques Villermaux**, *Génie de la réaction chimique : conception et fonctionnement des réacteurs*, Éditions Tec & Doc, 1993.
- **Daniel Schweich**, *Génie de la réaction chimique*, Éditions Tec & Doc, 2001.
- **Gilbert F. Froment & Kenneth B. Bischoff**, *Chemical Reactor Analysis and Design*, Wiley, 2010.
- **Searson, D. P., Willis, M. J., & Wright, A.**, *Reverse Engineering Chemical Reaction Networks from Time Series Data*, 2014.
- **Marote, P., Martin, M., Bonhomme, A., Lantéri, P., & Clément, Y.**, *Artificial Intelligence for Reverse Engineering: Application to Detergents Using Raman Spectroscopy*, 2023.
- T**echniques de l'Ingénieur**, *Procédés chimiques : Dossier complet*.