

Avant-projet

SOUTIEN AUX CHAIRES INDUSTRIELLES

Conformément à la Délibération de la Commission Permanente du Conseil Régional Grand Est 20CP-1834 du 27 novembre relative au déploiement de la Stratégie Régionale en faveur de l'Enseignement Supérieur, de la Recherche et de l'Innovation (SRESRI), la Région Grand Est souhaite, par l'action 30 « Soutien aux chaires industrielles », amplifier les passerelles entre la recherche académique et les entreprises, en créant un environnement de recherche de haut niveau.

Le dispositif vise à :

- rapprocher le secteur de la R&D privée du potentiel académique de recherche régional pour augmenter l'investissement en R&D et favoriser la participation des organismes de recherche et de transfert de technologie au développement de produits et procédés innovants ;
- orienter le soutien régional vers la recherche à fort potentiel d'innovation et attirer le recrutement de chercheurs de haut niveau ;
- accroître l'employabilité de personnels hautement qualifiés formés à une double culture de laboratoire et entreprise.

Il a vocation à retenir au maximum 3 projets par an, dans la limite des disponibilités budgétaires.

Il s'organise au fil de l'eau et est en deux étapes :

- analyse de l'éligibilité du projet sur la base d'un avant-projet ;
- sélection des projets retenus sur la base d'une instruction du dossier complet.

L'**examen de recevabilité sur la base d'un avant-projet** constitue la première étape du processus de sélection des dossiers (se référer au règlement du dispositif pour le descriptif complet de la méthode de sélection).

La rédaction de **ce document doit permettre d'évaluer l'éligibilité du projet au regard des critères**, tels que détaillés dans le règlement du dispositif :

- o la cohérence du projet avec les thématiques prioritaires identifiées dans le cadre des politiques régionales ;
- o l'implication financière (en numéraire) d'au moins une entreprise du Grand Est ;
- o l'implication des entreprises partenaires à hauteur de 25% minimum des dépenses éligibles¹ ;
- o la confirmation d'un autre cofinancement public (hors apport de l'établissement d'accueil) ;
- o le portage de la chaire par un chercheur ou enseignant chercheur de notoriété internationale ou nationale, avec une expérience avérée et réussie de partenariat avec le monde économique, occupant au moins 50 % de son temps de recherche aux travaux propres de la chaire.

Cet avant-projet est à transmettre **en version électronique uniquement**, sous forme de fichier Word, à : chairesindus@grandest.fr

Toute question est à adresser à : chairesindus@grandest.fr

Le document doit être rédigé en police ARIAL 10. Merci de respecter les indications concernant le nombre de page pour chaque item à remplir. Aucune annexe n'est acceptée.

La validation du caractère de recevabilité, sur la base de l'avant-projet, n'entraîne pas la sélection automatique du projet. Elle permet au porteur de déposer un dossier de candidature, fourni par la Région, pour instruction selon la procédure décrite dans le règlement du dispositif.

¹ Ce coût s'entend hors apports en nature (personnel permanent de l'établissement d'accueil, frais de personnel et accès machines pour la (les) entreprise(s) partenaire(s)) et hors frais généraux pour l'établissement d'accueil.

I. RAPPEL DES THEMATIQUES IDENTIFIEES DANS LES POLITIQUES REGIONALES

Les projets devront s'inscrire en cohérence avec les **trois enjeux de transition écologique et environnementale, numérique et industrielle** et dans les thématiques d'excellence déjà identifiées (santé, chimie, matériaux, ...) fédératrices couvrant l'ensemble des domaines de la recherche et susceptibles de générer des innovations.

Les travaux menés devront pouvoir alimenter les connaissances dans les domaines identifiés de la Stratégie de spécialisation intelligente (S3) dont les perspectives de transfert et d'innovation sont avérées : **Technologies et équipements pour la transition industrielle ; Recyclage et fonctionnalisation des matériaux ; Biotechnologies médicales ; Outils numériques pour la santé ; Dispositifs médicaux ; Molécules et matériaux biosourcés ; Outils et systèmes pour la gestion durable et intelligente des ressources naturelles ; Systèmes énergétiques et leur performance**).

Le projet pourra :

- s'inscrire dans le champ de la **Bioéconomie** (bioressources, chimie du végétal et biotechnologies industrielles, matériaux biosourcés, bioénergies, alimentation humaine et végétale, procédés et technologies...);
- relever des thématiques de l'**Intelligence Artificielle** (intégration de l'IA, application de l'IA...);
- relever de thématiques en lien avec d'autres politiques régionales telles que la **stratégie hydrogène**, le **plan Industrie du Futur**, la **feuille de route Santé**.

II. FICHE D'IDENTITE DU PROJET

A. INTITULE DE LA CHAIRE	
Acronyme	MULTIMINE
Titre complet	Approches multi -échelles pour la séparation des minéraux
B. ETABLISSEMENT DE RECHERCHE OU D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR PORTEUR DE LA CHAIRE	
Nom	Université de Lorraine
Adresse	34 Cours Léopold, 54000 NANCY
C. RESPONSABLE PORTEUR DU PROJET - POUR L'ETABLISSEMENT DE RECHERCHE OU D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR	
Nom et Prénom	BADAWI Michaël
Fonction	Maître de Conférences HDR
Téléphone fixe	03 72 74 98 67
Téléphone portable	06 88 59 94 96
Mél	michael.badawi@univ-lorraine.fr
D. UNITE DE RECHERCHE / LABORATOIRE DE RATTACHEMENT DE LA CHAIRE	
Nom	Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques (LPCT)
Adresse	Université de Lorraine - Faculté des Sciences et Technologies

	Boulevard des Aiguillettes - Bât 2e cycle - Entrée 2A 54500 Vandœuvre-lès-Nancy
Responsable (nom et prénom)	KAREVSKI Dragi
E. ENTREPRISE PARTENAIRE	
Nom de l'entreprise	ArcelorMittal Maizières Research SA
Adresse	Voie Romaine, BP 30320, 57283 Maizières-lès-Metz
SIRET	380 347 591 00105
Représentant légal (nom, prénom, fonction)	Monsieur Frédéric GREIN, en sa qualité de Directeur Général et Monsieur Jean-Paul Allemand, en sa qualité de directeur du centre Process.
<i>Si plusieurs entreprises partenaires, dupliquer la rubrique E pour chacune</i>	
F. DUREE PREVUE DU PROJET (en mois, maximum 60 mois)	
Durée totale : 60 mois	
Date de début et de fin du projet : du 01/10/2021 au 30/09/2026	
G. COUT DU PROJET, €	
Coût total prévisionnel du projet :	2 850 000 €
Coût éligible prévisionnel du projet ¹ :	2 000 000 €
H. MONTANT DE LA SUBVENTION REGIONALE SOLLICITEE PAR LE PORTEUR ACADEMIQUE, €	
120 000 € par an, soit 600 000 € au total	
I. CO-FINANCEMENT ENTREPRISE(S) PARTENAIRE(S), EN NUMERAIRE, €	
120 000 € par an, soit 600 000 € au total	
J. AUTRES CO-FINANCEMENTS PUBLICS, EN NUMERAIRE (hors apports de l'établissement d'accueil), €	
<i>Si plusieurs co-financeurs publics, préciser le co-financement apporté par chacun</i>	
45 000 € par an escompté des collectivités locales	
K. EXIGENCE DE CONFIDENTIALITE	
<input type="checkbox"/> Oui <input checked="" type="checkbox"/> Non Si oui, motif :	

¹ Ce coût s'entend hors apports en nature (personnel permanent de l'établissement d'accueil, frais de personnel et accès machines pour la (les) entreprise(s) partenaire(s)) et hors frais généraux pour l'établissement d'accueil.

III. CONTEXTE, POSITIONNEMENT ET OBJECTIF(S) DU PROJET DE CHAIRE

Le projet et ses objectifs (1/2 page)

L'Europe possède un potentiel considérable en ressources minérales qui sont, cependant, souvent contenues dans des minerais complexes toujours plus fins et de teneurs toujours plus faibles. Leur valorisation nécessite une optimisation significative des procédés courants tels que la séparation par gravité ou la flottation, et en particulier, le développement de réactifs de flottation très sélectifs afin d'en améliorer l'efficacité.

La flottation repose sur l'adsorption sélective de différents réactifs (collecteurs) en solution sur les surfaces des minéraux ciblés dans le but de les rendre hydrophobes et de les récupérer avec l'injection de gaz. La formulation des collecteurs, molécules formées d'un groupe polaire et d'une chaîne aliphatique apolaire, peut être adaptée (longueur de chaîne, fonctionnalisation, etc.) et la combinaison de réactif peut permettre par effet synergique améliorer les performances du procédé. Ces différentes pistes d'optimisations sont difficiles à étudier expérimentalement mais de puissants outils de modélisation moléculaire empruntés aux sciences chimiques offrent des perspectives prometteuses. Les deux méthodes les plus utilisées sont les dynamiques moléculaires classique (fondée sur la description de champs de force) et *ab initio* (fondée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)) qui diffèrent par leur précision, les phénomènes pris en compte, la taille des systèmes, et les temps et coûts de calcul. Les méthodes DFT conviennent de manière satisfaisante à l'étude des collecteurs et peuvent servir d'outils de prédictions pour l'amélioration des performances de flottation en prenant en compte de nombreux paramètres. L'application de ces outils à la flottation est récente mais montrent des résultats encourageants et pourrait devenir, à l'avenir, incontournable et cruciale pour l'optimisation du procédé.

Notre axe d'optimisation est de favoriser la formation de couches stables de collecteurs adsorbés sélectivement sur les minéraux ; condition de l'obtention d'une séparation minérale encore jamais atteinte mais indispensable pour traiter les minerais dont la complexité réside dans la présence de minéraux avec des propriétés de surface similaires. Les effets synergiques entre réactifs pourront être évalués. Ces objectifs permettront non seulement de récupérer efficacement les minéraux porteurs des métaux ciblés mais aussi d'extraire une large gamme de co-produits d'intérêt industriel. Permettant de limiter la consommation en réactif et en eau et donc de réduire considérablement l'impact environnemental, influençant positivement son acceptabilité sociétale. Nous étudierons d'abord les minerais du fer, priorité historique d'ArcelorMittal.

L'objectif principal de la chaire est de développer des modèles dits « clés en main » capable de décrire les mécanismes moléculaires mis en jeu lors de l'adsorption aux interfaces pour la flottation.

Les modèles prendront en considération la plupart des paramètres influençant la flottation tels que la température, la présence d'eau, ou encore les nombreux réactifs utilisés dans le procédé, par :

- La compréhension des phénomènes d'hydratation et d'adsorption des réactifs ;
- La validation empirique des modèles ;
- La recherche de réactifs offrant une meilleure sélectivité ;
- L'étude de l'influence de la minéralogie dans la compétition pour l'adsorption des réactifs.

Mots clés : Modélisation moléculaire, génie minier, flottation, adsorption, fer

Enjeux économiques, sociétaux et environnementaux (10 lignes maximums)

Avec près de 3 milliards de tonnes produites chaque année dont plus de la moitié extraite des mines, le fer est aujourd'hui le métal le plus utilisé dans le monde. ArcelorMittal est premier producteur d'acier au monde et, par conséquent, l'un des plus gros consommateurs de minerai de fer. L'industrie sidérurgique est confrontée à un déclin des gisements de fer haute qualité nécessitant de procédés d'enrichissement élaborés. Or, ces derniers sont encore très empiriques et compte tenu de la tension grandissante sur le marché mondial des métaux ; il est dorénavant crucial de mieux comprendre ces procédés afin de les améliorer de façon significative. Ces enjeux économiques et sociétaux inscrivent donc ce projet parfaitement dans les thèmes « Technologies et équipements pour la transition industrielle » et « Outils et systèmes pour la gestion durable et intelligente des ressources naturelles ». De plus, ce projet est au cœur de la chimie, des matériaux, des réactifs biosourcés et de l'intelligence artificielle qui sera fortement employée pour optimiser les simulations moléculaires du projet.

IV. PARTENARIAT(S) INDUSTRIEL(S)

Implication d'ArcelorMittal et positionnement de la Chaire dans la stratégie de l'entreprise (1/2 page maximum)

ArcelorMittal est le 1^{er} producteur mondial d'acier avec 97 millions de tonnes produites en 2017 et le 5^e producteur mondial en minerais de fer représentant 58 millions de tonnes produites en 2018). Le centre R&D ArcelorMittal de Maizières-lès-Metz est le plus grand site de recherche du groupe (600 employés sur les 1400 répartis dans le monde), et comprend en particulier le département Mining qui traite toute la recherche et le développement en génie minier du groupe.

Les minerais de fer des mines d'ArcelorMittal sont de plus en plus complexes et de plus en plus fins, et pour correspondre aux demandes des processus métallurgiques en termes de qualité, il sera désormais nécessaire d'avoir recours à des procédés de séparation minérale différents que ceux utilisés à l'heure actuelle. Le procédé de choix pour le traitement des minerais fins et l'obtention de concentrés de haute qualité est la flottation. L'entreprise a donc besoin d'augmenter ses connaissances sur ce procédé afin d'anticiper les changements minéralogiques de ces mines et du besoin des procédés métallurgiques.

Par ailleurs, l'optimisation des procédés peut permettre des économies non-négligeables lors des traitements, ce qui peut représenter des millions d'euros et une diminution de la consommation d'énergie globale. Par exemple, une réduction de la teneur de la silice dans les hauts fourneaux d'une mine d'ArcelorMittal au Mexique a pu économiser environ 30 millions de US \$ par année. De plus, une optimisation des procédés et des formulations de réactifs impliquera une consommation plus raisonnée avec des apports plus contrôlés en eau, ce qui s'implique parfaitement dans une démarche de production de fer plus verte.

Cette optimisation de procédés de séparation minérale permettra également d'exploiter plus longtemps des mines dont les qualités de minerais baissent et de s'intéresser à des gisements peut-être encore jugés non-exploitable à l'heure actuelle, mais aussi de considérer des procédés avec la valorisation d'éventuels co-produits aujourd'hui rejetés. Enfin, il sera possible de valoriser les stériles de mines riches en différents métaux et en fer pour une gestion plus durable des mines.

La chaire bénéficiera de la double expertise du LPCT (Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques) en modélisation et simulation numérique à l'échelle moléculaire, et du laboratoire GeoRessources en flottation / génie minéral, et d'une installation pilote à Maizières (ArcelorMittal). Cette dernière, d'une capacité continue jusqu'à 500 kg/h de minerai traité, permettra d'étudier le transfert technologique, depuis les aspects fondamentaux et expérimentaux vers une échelle industrielle. ArcelorMittal soutient fortement cette démarche multi-échelles et s'est engagé à alimenter cette chaire à hauteur de 120 k€ par an.

V. TITULAIRE-COORDINATEUR DE LA CHAIRE

Le titulaire de la chaire Michaël Badawi, enseignant-chercheur à l'Université de Lorraine depuis 2011, consacra 50% de son temps à l'animation de cette chaire. Son activité de recherche est à l'interface entre modélisation, expérimental, physico-chimie et géologie. Il a soutenu son HDR, Modélisation *ab initio* de matériaux pour des applications en adsorption, catalyse et flottation en octobre 2019. Michaël Badawi a une production scientifique extrêmement soutenue et de qualité, qui augmente d'année en année. Avec 100 publications à 40 ans (dont 23 en 2020) et 25 invitations à des séminaires et conférences internationales, M. Badawi est reconnu à l'international comme un expert dans de nombreux types de simulations atomistiques (DFT, AIMD, machine learning) ainsi que dans l'adsorption et les expériences spectroscopiques. Il a développé de nombreuses collaborations internationales et industrielles (ArcelorMittal, BASF, EDF, Areva, IRSN, IRSN), et a une expérience avérée en encadrement de doctorants et jeunes chercheurs/chercheuses et en montage et gestion de projets de recherche (ANR, FEDER, H2020, PHC ...).

Il a initié récemment un virage thématique vers le génie minier et la récupération de métaux dits critiques, thématique en plein essor au niveau mondial, et vitale pour notre avenir tant nous sommes de plus en plus dépendant des ressources minérales en dehors de l'Europe (terres rares, tungstène, ...). Son travail pionnier portant sur la modélisation des mécanismes d'hydratation de la fluorite a fait l'objet de la couverture de Journal of Physical Chemistry B en juillet 2018. De plus, les travaux suivants sur les effets synergiques de l'utilisation combinée de deux déprimants de flottation ont été largement reconnus puisque qu'ils ont fait l'objet d'une publication et d'une page de couverture dans Chemical Science (de facteur d'impact 9.5). Avec une dizaine de publications de premier plan parues en deux ans, son université qui est 1^{ère} au niveau européen dans le domaine du génie minier est passé du 25^e rang mondial au 11^{ème} en 2 ans. Le projet

proposé ici est totalement pluridisciplinaire (de la chimie quantique vers la géologie) avec une importante sociétale forte. L'approche multi-échelle que défend M. Badawi dans son projet est tout à fait originale et pourrait très bien révolutionner le domaine. Enfin, M. Badawi développe également des approches méthodologiques originales (machine learning ou physique statistique appliquée à la modélisation des isothermes d'adsorption) qui sont de fortes contributions à la communauté de l'adsorption en général. Son dynamisme et son réseau de collaboration ont permis à M. Badawi de décrocher plusieurs financements conséquents nationaux et internationaux, ce qui lui permis d'animer aujourd'hui un groupe de 3 doctorants et 4 postdoctorants.