

Chaire Fondation Tuck – IFP School

Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse

Rapport d'activités

Ce document présente un bilan des actions réalisées depuis 2010 dans le cadre de la chaire « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse ». Elle permet de regrouper des actions de recherche, de formation et des actions extérieures et ainsi elle améliore la visibilité d'une thématique essentielle mais encore peu visible car non directement reliée au marché.

1 Introduction

IFP Energies nouvelles (IFPEN) a comme ambition de se positionner comme acteur majeur sur le nouveau marché de l'énergie qui s'est créé suite au défi de la transition énergétique : à partir d'un monde fortement dépendant des hydrocarbures, il faudra évoluer vers un panel beaucoup plus large de solutions. A ce titre, IFPEN participe à des réflexions au niveau national et international, réalise des actions de recherche et forme des jeunes ingénieurs aux défis de demain.

Les chaires ont été voulues par la direction d'IFPEN pour rassembler et renforcer un certain nombre d'actions cibles qui permettent de créer des ponts entre la recherche et l'enseignement. Ainsi, elles permettent de fortifier des actions de recherche nécessaires et de sensibiliser les étudiants aux besoins de ces thématiques phares. Cela permet également d'améliorer la visibilité d'IFPEN et d'IFP-School dans des actions extérieures telles que des conférences ou la participation à des sociétés savantes.

Ce document résume les actions menées durant les trois ans d'existence de la Chaire de la fondation Tuck « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse ». Il s'articule autour des trois grands axes que constituent cette chaire :

- Recherche avec les développements autour de l'équation d'état GC-PPC-SAFT ;
- Enseignement avec la réforme pédagogique ;
- Activités extérieures avec les actions de promotions dans des congrès et sociétés savantes.

2 Actions recherche

Plusieurs projets phare à IFPEN ont pour objectif de valoriser des produits issus de la biomasse en substitut des bases pétrolières. Aux deux grands projets Futurool, dont les pilotes fournissent des résultats, et BioTFuel, pour lequel la construction d'unités pilotes est envisagée cette année, s'est ajouté le projet Bingo qui est porteur de nouveaux défis techniques du fait d'une charge très complexe. En ce qui concerne la mise à disposition de nouvelles bases pour la pétrochimie (synthons), on peut également citer en exemple le projet BioButterfly avec Michelin, qui a pour objectif de fournir du butadiène biosourcé à l'industrie des élastomères, et les projets de déshydratation des alcools en oléfines biosourcées pour les unités de polymérisation.

La faisabilité et le dimensionnement de ces procédés requièrent une bonne description des propriétés physico-chimiques des fluides. Le rôle de la direction Physico-Chimie, et plus particulièrement du département « Thermodynamique et Simulation Moléculaire » est de développer des outils qui prennent en compte la structure moléculaire des composés pour permettre la simulation de procédés dans les meilleures conditions.

Une journée thématique s'est tenue à IFPEN Solaize le 22 Mars 2012 pour permettre un échange avec les équipes qui développent des procédés¹. Elle a clairement fait apparaître des besoins différents suivants les étapes d'avancement du procédé :

- les procédés qui sont dans leur étape de dimensionnement ont besoin de modèles très précis, avec un nombre de molécules bien identifiées. Dans ce cas, des acquisitions expérimentales peuvent être effectuées pour combler les lacunes et la régression de paramètres sur des modèles disponibles dans les simulateurs suffisent.
- Les procédés qui sont en instruction, pour lesquels le choix des solvants ou le type de molécule est relativement flou. Dans ce cas, il n'est pas envisageable de réaliser des mesures, mais des premières tendances en utilisant des méthodes de contribution de groupes peuvent répondre au besoin.
- Les procédés dont les charges sont mal définies, et qui nécessitent encore des efforts de recherche. . C'est dans ce cas que les systèmes les plus pertinents doivent d'abord être identifiés, pour ensuite développer des outils prédictifs adaptés aux charges en question.

L'équation d'état SAFT (Statistical Association Fluid Theory)² est développée dans ce but à IFPEN depuis plusieurs années. Elle décrit explicitement les différents types d'interactions moléculaires rencontrés, telles la dispersion, la polarité ou la présence de liaisons hydrogène. A ce titre, cet outil crée un lien entre la vision moléculaire des mélanges et la simulation moléculaire ; cette dernière pouvant générer des données pseudo-expérimentales et permettre d'examiner les phénomènes (agrégation, liaison hydrogène) à l'échelle moléculaire.

De nombreux travaux dans la littérature existent sur cette équation. L'objectif de nos travaux ne concerne pas tant l'amélioration de l'équation en tant que telle, mais plutôt sa mise à disposition, d'abord en proposant des paramètres adaptés aux charges complexes, ensuite en la mettant à disposition au travers d'outils accessibles aux utilisateurs des procédés.

Dans ce contexte, la chaire a permis de réaliser un certain nombre d'actions qui sont listées ci-dessous.

2.1 Travaux de thèse et post-doc

2.1.1 Développement d'outils en simulation moléculaire (N. Ferrando)

Cette thèse³, démarrée avant le début de la chaire, a été soutenue le 15 juin 2011. Elle a permis d'améliorer les potentiels d'interaction d'un certain nombre de composés oxygénés, permettant ainsi une bonne représentation des masses volumiques, tensions de vapeur, enthalpies de vaporisation, propriétés critiques et structure de la phase liquide de nombreux constituants complexes. Une méthode a par ailleurs été adaptée pour calculer des diagrammes azéotropiques. Dans la continuité de cette thèse, une nouvelle méthode a également été implémentée dans le code de calcul pour évaluer les coefficients de partage de composés oxygénés entre deux phases liquides (coefficients de partage de solutés entre l'eau et l'octanol). Ces derniers sont particulièrement difficiles à représenter en simulation moléculaire à cause de la compacité élevée des deux phases liquides présentes.

¹ Compte rendu de réunion R0740R-JCdH/sg -12/100

² Une brève description en a été donné dans le rapport de chaire précédent R0740R-JCDH/bd -12/091

³ N. Ferrando : « Potentiels intermoléculaires et algorithmes de Monte Carlo : application à l'étude des composés oxygénés » 15 juin, 2011 ; Thèse Université Paris-Sud

Ces travaux à l'échelle moléculaire ont permis de réaliser un premier pas pour le paramétrage de l'équation SAFT à partir de données moléculaires⁴.

2.1.2 Développement de l'équation GC-PPC-SAFT pour des molécules multifonctionnelles (post-doc Dong Nguyen-Huynh)

Le post-doc D. Nguyen-Huynh a étudié un grand nombre de mélanges contenant des molécules complexes polaires et auto-associées. Ces travaux ont donné lieu (outre des présentations à congrès) à deux rapports^{5,6} et plusieurs publications^{7,8}

2.1.3 Caractérisation de mélanges complexes (thèse Thanh Binh Nguyen)

Cette thèse a été proposée dans le cadre de la chaire. L'étudiant a été recruté dans le master recherche « Catalyse et Procédés » dont il est question plus loin, en décembre 2010. Son travail concerne la description de charges complexes pour l'équation d'état PPC-SAFT. Il est réalisé en collaboration avec le Professeur G. Kontogeorgis de l'Université Technique du Danemark, où l'étudiant a réalisé un séjour de 6 mois dans le courant 2012. Outre son rapport de mi-thèse⁹, il a réalisé deux posters¹⁰ et une publication qui a été acceptée¹¹. Une seconde a été soumise.

2.1.4 Développement de SAFT pour l'hydrotraitement (thèse Thi Kim Hoang Trinh)

Suite aux travaux de stage menés en collaboration avec Paris 13¹², il est apparu que les mélanges avec l'hydrogène, pourtant essentiels dans l'hydrotraitement, sont généralement mal représentés. Une nouvelle thèse a donc été proposée sur ce thème, et elle a débuté en octobre 2012. La candidate est également issue du master recherche « Catalyse et Procédés » dont il est question plus loin. Une proposition de communication a été faite au congrès GP2013, à Lyon en octobre 2013¹³.

⁴ Ferrando, N. de Hemptinne, J-C; Mougin, P.; Passarello, J-P: « Prediction of the PC-SAFT associating parameters by molecular simulation » J. Phys. Chem B, 2012, **116**, 367-377

⁵ NguyenHuynh, D. ; Lugo, R. ; de Hemptinne, J-C : « Extension de l'équation GC-PPC-SAFT aux mélanges contenant de l'eau, des hydrocarbures et des composés oxygénés multifonctionnels » Rapport IFPEN 61984 (Septembre 2011)

⁶ NguyenHuynhD., Lugo R., de Hemptinne J.C., Mise à jour du code de calcul GC-PC-SAFT polaire (GC-PPC-SAFT); Modélisation des équilibres liquide-liquide et liquide-vapeur de mélanges contenant des molécules oxygénées multifonctionnelles, 2009, rapport IFP Energies nouvelles n°61097.

⁷ NguyenHuynh, D. ; Passarello, J.P; de Hemptinne, J-C; Tobaly, P.: Extension of GC-SAFT to systems containing some oxygenated components: application to ethers, aldehydes and ketones, Fluid Phase Equilibria, 2011, vol 307, n°2, pp 142-159

⁸ NguyenHuynh, D. ., de HemptinneJ.C., Lugo R., Passarello J.P., Tobaly P., Modeling Liquid-Liquid and Liquid-Vapor Equilibria of Binary Systems Containing Water with an Alkane, an Aromatic Hydrocarbon, an Alcohol or a Gas (Methane, Ethane, CO₂ or H₂S), Using Group Contribution Polar Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, **50**, n°12, p. 7467-7483.

⁹ Nguyen, T.B.: «Representation of oxygenated fluids associated with biomass valorization», Rapport IFPEN 62245 Mai 2012

¹⁰ Nguyen, T.B., de Hemptinne, J-C, Creton, B.; Kontogeorgis, G. : « EVALUATION OF THE GC-PPC-SAFT EQUATION OF STATE FOR VLE AND LLE PREDICTIONS OF BIOMASS FLUIDS » Accepté pour presentation Poster au séminaire «Industrial use of Molecular Thermodynamics», Lyon, 19 et 20 mars 2012

¹¹ Nguyen, T.B.; de Hemptinne, J-C; Creton, B.; Kontogeorgis, G.: «GC-PPC-SAFT equation of state for VLE and LLE of hydrocarbons and oxygenated compounds. Part I: Sensitivity analysis» Accepted for publication in *Industrial Engineering Chemistry Research*

¹² M. Kadri , J-P Passarello, J-C de Hemptinne « Etudes des équilibres de phase entre H₂ + oxygénés à l'aide de l'équation d'état GC-PPC-SAFT » Rapport IFPEN 61571

¹³ Trinh, T.K.H ; de Hemptinne, J.C. ; Lugo, R. ; Passarello ; J-P : « La solubilité de l'hydrogène dans les composés oxygénés en utilisant l'équation d'état (EOS) GC-PPC-SAFT » soumis pour publication (poster) à GP2013, Lyon, 8-10 octobre 2013

2.2 Travaux de développement

2.2.1 Mesure et modélisation de produits issus de la biomasse (C. Fejean)

Après une revue détaillée des charges oxygénées potentiellement présents dans les charges complexes¹⁴, des travaux expérimentaux ont été menés dans le cadre du projet PAB qui étudie les liquéfiats de charbon et du DSTC XAP sur la thermodynamique des systèmes complexes. Des mesures ont été réalisées pour établir les équilibres de certaines molécules oxygénés représentatives (phénol, m-crésol, 2ethyl-phénol, 2-3 benzofurane, catéchol) en présence de méthane et de CO₂. Des travaux de modélisation par équation d'état et par modélisation moléculaire ont repris ces mesures, ainsi que ceux de la littérature, pour fournir une vue d'ensemble du comportement de ces mélanges, y compris avec une charge réelle. Ces comparaisons ont permis de valider les capacités de l'équation GC-PPC-SAFT à reproduire de telles données d'équilibre. Ces travaux ont fait l'objet de deux rapports.^{15, 16}

2.2.2 Application du modèle GC-PPC-SAFT aux systèmes contenant des molécules oxygénées multifonctionnelles (L. Grandjean)

Un apprenti IFP-School a été recruté dans l'année 2012 et a permis de réaliser une série de travaux qui étaient nécessaires pour permettre l'industrialisation de l'équation GC-PPC-SAFT. Le candidat a travaillé sur

- le paramétrage des composés furaniques en complément d'une thèse (Eric Auger) dans le cadre du projet ANR MEMOBIOL à Paris¹⁷
- un cas d'étude pour la commercialisation de PPC-SAFT (ternaire eau + butane + éthanol)¹⁸ en vue de le proposer à ProSim

Par ailleurs, les paramètres de l'ammoniac ont été déterminés, et une publication, non encore soumise, a été rédigée¹⁹. Un rapport IFPEN en cours de relecture résume l'ensemble des travaux.²⁰

2.2.3 Mise à disposition de paramètres régressés pour plusieurs projets procédé (N. Ferrando, J-C de Hemptinne)

L'équation d'état SRKS (modèle SRK utilisant la règle de mélange de Twu) a été paramétrée pour divers procédés mettant en jeu la biomasse :

- *Ethanol to Ethylène (ETE)* :

¹⁴ C. Féjean, R. Lugo : « Représentation thermodynamique des charges oxygénées : étude bibliographique et constitution d'une base de donnée » Rapport IFPEN 61882 (Juin 2011)

¹⁵ C. Féjean ; S. Betouille : « Modélisation thermodynamique des systèmes contenant des oxygénés » Note technique R074-CF/sb-n° 024

¹⁶ Fejean, C. ; Betouille, S. ; Ferrando, N. : « Etude des équilibres thermodynamiques de systèmes binaires, ternaires et multi-constituants contenant des dérivés phénoliques et furaniques en présence de CH₄, CO₂, H₂, H₂S, CO et NH₃ », rapport IFPEN n° 62234 (avril 2012)

¹⁷ L. Grandjean : « Modélisation des équilibres liquide-vapeur de mélanges contenant des composés furaniques avec le modèle thermodynamique GC-PPC-SAFT. Cas du furane et du 2-méthyl furane » Note technique R0740r-LG/bd-12/182

¹⁸ L. Grandjean : « Étude de l'équilibre liquide-liquide du système ternaire n-Butane – Ethanol – Eau à l'aide du modèle GC-PPC-SAFT » Note technique R0740R-LG/bd – 12/268

¹⁹ L. Grandjean, J-C de Hemptinne, R. Lugo: " Application of GC-PPC-SAFT EoS to ammonia and its mixtures" to be submitted to Fluid Phase Equilibria

²⁰ L. Grandjean, J-C de Hemptinne : « Application du modèle thermodynamique GC-PPC-SAFT aux systèmes contenant des molécules oxygénées multifonctionnelles et issus de la liquéfaction du charbon ou de la biomasse lignocellulosique » Rapport IFPEN en cours de relecture

Ce procédé qui vise à déshydrater du bio-éthanol en éthylène met en jeu un grand nombre de molécules oxygénées en quantité plus ou moins importante (éthanol, méthanol, eau, acétaldéhyde, alcools, aldéhydes, cétones, esters et acides en C3/C4, éthylène glycol, diéthylène glycol, ...), hydrocarbures (éthylène, oléfines en C3/C4,...) et gaz incondensables (CO₂, CO, H₂, ...). Plusieurs notes, déjà mentionnées l'année dernière, ont été complétées par un rapport²¹. Chacune de ces notes correspond à la livraison d'une bibliothèque de paramètres à utiliser dans PRO/II. Ce modèle a été étendu en 2012 à de nouveaux constituants²²

- *Fermentation IBE (Isopropanol-Butanol-Ethanol):*

Ce procédé consiste à produire de l'isopropanol par voie fermentaire, et met en jeu divers composés oxygénés (principalement alcools et eau). Le modèle ci-dessus a été complété pour tenir compte des constituants présents dans ce milieu et des équilibres liquide-liquide-vapeur mis en jeu²³.

- *Production de Butadiene biosourcé*

Ce procédé consiste à produire du 1,3-butadiene à partir de la biomasse, soit par voie Lebedev (réaction de bio-éthanol avec de l'acétaldéhyde), soit par déshydrogénation de butène (issu d'oligomérisation d'éthylène biosourcé via le procédé ETE). Ces procédés mettent également en jeu un grand nombre de molécules oxygénées issues de différentes familles chimiques. Une première note décrit le modèle paramétré pour la production du butadiène par voie Lebedev²⁴.

- *Production d'acide lactique*

La réaction de conversion de la cellulose en acide lactique se passe en milieu aqueux à 190 °C sous une pression en hélium ou en hydrogène de 5 bar. La réaction est sélective à 54% en acide lactique et donc on récupère en sortie beaucoup de coproduits. La solubilité de l'hydrogène dans ce milieu a été étudiée. Une courbe maîtresse qui décrit la solubilité de l'hydrogène dans l'eau et des solutions aqueuses de sucres a été proposée. Malheureusement, nous n'avons pas réussi à trouver un paramétrage SAFT adapté pour le binaire eau + hydrogène²⁵. C'est un verrou qui justifie la mise en place d'une nouvelle thèse initiée fin 2012 en collaboration avec Paris 13.

2.3 Participation au projet ANR MEMOBIOL

Le projet ANR Memobiol regroupe des chercheurs (ENSTA, LSPM, Mines-ParisTech) et des industriels (PROSIM, Materials Design, IFP Energies nouvelles). Il a pour objectif : 1) d'identifier des molécules cibles issues de la biomasse et potentiellement à haute valeur ajoutée pour les applications en chimie, et 2) de fournir des outils pour les caractériser en vue de permettre des calculs prédictifs d'équilibre de phase.

En plus de ses actions de coordination du projet, IFPEN participé à différentes actions menées avec les autres partenaires : 1) le LSPM en forte collaboration avec l'ENSTA et IFPEN poursuit l'amélioration de l'équation GC-PPC-SAFT, 2) Armines effectue des mesures expérimentales originales de type liquide-liquide, avec des composés oxygénés, et 3) l'ENSTA mène un travail sur la méthode COSMO permettant de restituer le comportement macroscopique des mélanges oxygénés à partir d'une description quantique des molécules.

²¹ N. Ferrando : " Modélisation thermodynamique du procédé de déshydratation de l'éthanol (ETE) – Rapport de synthèse ", Rapport IFPEN 62060, Novembre 2011.

²² N. Ferrando : « Nouvelle mise à jour du modèle thermodynamique pour le procédé Ethanol to Ethylene (ETE) : Thermo_ETE_v7.lb » Note Technique R0740r – NF/bd – 12/035

²³ N. Ferrando « Modèle thermodynamique pour la section séparation du procédé de fermentation isopropanol-butanol-éthanol (FIBE) » R0740R – NF/bd 11/359

²⁴ N. Ferrando : « Paramétrage du modèle thermodynamique SRKS pour le procédé de production de 1,3-butadiene par voie Lebedev » Note Technique R0740r-NF/bd-12/140

²⁵ J-C de Hemptinne : « Effet de la présence de molécules d'oxygénées pour la solubilité de l'hydrogène dans l'eau » R0740R-JCDH/mj-154/11

Dans ce cadre, une publication a été soumise à la revue « Fluid Phase Equilibria »²⁶. Nous avons mentionné plus haut les travaux réalisés par Laurent Grandjean afin de reproduire et améliorer le paramétrage de certaines molécules. Ces travaux ont fait l'objet d'un poster à la conférence ESAT en 2012.²⁷

2.4 Industrialisation de l'équation d'état GC-PPC-SAFT

2.4.1 Fourniture de UAS PRO II

L'équation d'état a été mise à disposition de la direction procédés dans le logiciel PRO II, au travers d'une UAS (User Added Subroutine) ainsi qu'une série de paramètres (hydrocarbures + oxygénés).

2.4.2 Commercialisation de SAFT au travers de la société ProSim S.A.

Nos codes de l'équation GC-PPC-SAFT ont été fournis à l'entreprise ProSim qui est revendeur de logiciel de simulation de procédés. Ainsi, tout client de ProSim aura dorénavant accès à cette équation, avec une banque de paramètres de 280 constituants (hydrocarbures + oxygénés).²⁸

2.4.3 Mise à disposition de SAFT au travers de Carnot.

On peut mentionner également la mise à disposition, en 2011, du modèle GC-PPC-SAFT dans la bibliothèque thermodynamique d'IFPEN : CARNOT. Cette insertion permettra de mettre à disposition le modèle plus facilement à tous les projets qui en auront besoin dans l'avenir. Une interface pour la régression de paramètres a également été développée.

2.5 Conclusions et perspectives des actions R&D

L'analyse qui précède montre que les actions menées dans le cadre de la thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse sont répartis sur plusieurs projets. Ils recouvrent l'ensemble des thématiques mises en œuvre par le département « Thermodynamique et modélisation moléculaire » :

- Travaux expérimentaux
- Simulation moléculaire et *ab initio*
- Développement de modèles classiques

Les travaux effectués concernent aussi bien des développements méthodologiques (autour de la simulation moléculaire et de l'équation d'état SAFT), que de l'acquisition de données (en particulier ELV) ou de la mise à disposition de nouveaux outils de simulation.

Les verrous identifiés aujourd'hui sont les suivants :

- pour une utilisation plus facile de l'équation, il est essentiel d'en améliorer la résolution algorithmique. Ce travail doit être abordé sur deux plans : 1) l'adaptation des algorithmes de résolution d'équilibre de phase. Il est prévu de travailler avec un stagiaire en Mathématique appliquée (piloté par R11) pour avancer sur ce sujet, et ultérieurement avec un apprenti (2014). 2) l'optimisation de la résolution de

²⁶ M. Nala, E. Auger, I Gedik, N. Ferrando, M. Dicko, P. Paricaud, F. Volle, J-P Passarello, J-C de Hemptinne, P. Tobaly, P. Stringari, C. Coquelet, D. Ramjugernath, P. Naidoo, R. Lougo : « Vapour-Liquid Equilibrium for the systems furan + n-hexane and furan + toluene. Measurements, data treatment and modeling using molecular models » *Fluid Phase Equilibria*, 2012, Accepted for publication

²⁷ L. Grandjean, E. Auger, R. Lugo, A Di Lella, P. Tobaly, J-P Passarello, J-C de Hemptinne « Applying the PPC-SAFT EoS to multifunctional oxygenated compounds and their mixtures » Poster at 2012 ESAT meeting , Berlin 6-10 october 2012

²⁸ T.B. Nguyen, J-C de Hemptinne « Paramètres PPC-SAFT pour Prosim » Note Technique R0740R/JCDH/mj-203-11

l'équation d'état proprement dite, et plus précisément son terme associatif qui fait appel à des variables cachées. Ce travail sera initié en 2013 avec un spécialiste en R11.

- Lorsque les molécules traitées ne sont plus linéaires, la qualité prédictive de l'équation est fortement réduite. Un stagiaire, issu du master CEP va étudier cette question et en particulier proposer un traitement adapté du carbone quaternaire.
- On constate que les molécules polyfonctionnelles complexes restent difficiles à décrire. L'utilisation de descripteurs adaptés pourrait être utile dans ce but. Néanmoins, une réflexion préalable est nécessaire pour mieux comprendre les mécanismes d'interaction de ces molécules au niveau moléculaire. Un travail au niveau atomique réalisé dans ce but par un post-doc est en cours (R. Chaudret). Un autre post-doc, dont l'embauche est prévue dans le courant 2013, devrait se pencher sur les équilibres alcools-eau et amines-eau. Un visiteur scientifique participera également à ces travaux (C. Gambini Perreira).

3 Actions enseignement

Les actions d'enseignement sont des éléments essentiels dans la chaire « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse ». Elles sont toutes menées dans le cadre des activités du centre Raffinage, Pétrochimie, Gaz d'IFP-School.

Plus particulièrement, ces objectifs portent sur

- les liens à renforcer entre l'école et la recherche par le biais, entre autres, du master recherche « Catalyse et Procédés »,
- sur la sensibilisation, dans le cadre du programme Ingénieur (Energie et procédés), aux défis liés aux procédés qui traitent des produits ex-biomasse,
- sur la diffusion, par le biais d'un ouvrage, des compétences clés à développer pour pouvoir répondre aux difficultés associées au choix de modèles dans un simulateur de procédés..

3.1 Coordination pour IFP-School de la spécialité « Catalyse et Procédés »

Cette action est conduite en collaboration avec l'Ecole Centrale de Lille, l'Ecole de Chimie Lille et l'Université de Lille. Elle consiste à assurer une partie de la coordination de la spécialité, à participer au recrutement des étudiants, à leur suivi, à leur proposer des stages, à assister aux soutenances orales et aux différents jurys. Elle consiste également à assurer la promotion de cette spécialité auprès des populations d'étudiants concernés.

Les statistiques de recrutement et de nombre d'étudiants qui ont choisis de poursuivre en thèse sont fournies ci-dessous (figure 1). On voit que depuis un creux observé en 2008 et 2009, le nombre d'étudiants a atteint à nouveau un rythme de croisière, avec environ un diplômé sur deux qui poursuit en thèse. Généralement, une à deux de ces thèses se déroulent à IFPEN.

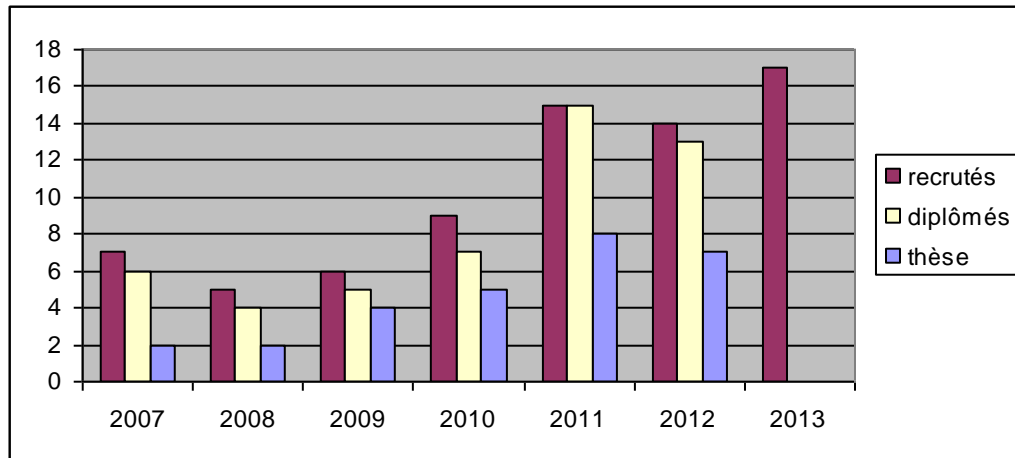


Fig. 1 Évolution du nombre d'étudiants pour le master de la spécialité « Catalyse et procédés»

Une collaboration plus étroite avec l'Université de Lille a été mise en place, ce qui devrait assurer un sourcing plus permanent dans les années à venir.

3.2 Réforme de l'UE Thermodynamique de la formation ENEP

3.2.1 Année 2010-2011 :

L'action phare qui a été engagée dans le cadre de la chaire consiste à revoir l'unité d'enseignement "Thermodynamique" du programme ENEP. Les cours théoriques proposés en début de scolarité ont été fortement réduits afin de laisser la place à un projet qui est proposé en collaboration avec des collègues de la direction Procédés et qui se déroule durant le second module (mars-avril).

L'objectif de ces projets est de :

- comprendre l'importance des volatilités (ELV) ou des solubilités (ELL) dans les procédés,
- apprendre à sélectionner et paramétrer un modèle thermodynamique,
- comprendre l'influence du choix du modèle sur le résultat du calcul de procédé.

Quatre journées entières (24 h) ont été proposées pour cela (voir leur description dans le rapport de chaire de première année).

Le retour des étudiants était le suivant : pour la première partie (septembre), ils considèrent que le cours va trop vite, avec trop peu d'exercices. Pour la seconde partie (nouvelle, avec la collaboration de R12), satisfaction générale, mais difficulté à s'impliquer à nouveau après quelques semaines de coupure.

3.2.2 Programme de l'année 2011-2012 :

Suite au retour des étudiants, des modifications ont été apportées au cours. Nous avons gardé la même structure générale:

- en septembre : 14 séances théoriques + 2 séances avec le Pr R. Dohrn (Bayer) + 2 séances d'examen
Cependant, afin de mieux illustrer la théorie, un projet (noté) a été intégré à cette session sur lequel ils travaillent en dehors des heures de cours. Cette proposition a fait l'objet d'une amélioration en 2012, à l'aide de la mise en place de sessions de e-learning de manière à permettre de prendre plus de temps en cours pour le projet.

- en mars-avril: le nombre de séances a été réduit à 8. Dans ce second module, on se concentrera sur les équilibres chimiques qui interviennent souvent dans les procédés. Ces séances commenceront par quelques rappels et se poursuivront par un travail dirigé, basé sur l'étude d'une colonne de lavage à la soude.

3.2.3 Programme de l'année 2012-2013 :

Suite à l'élan pédagogique, un début de mise en place de la pédagogie dite de « classe renversée » a été expérimenté cette année. Dans ce but, plusieurs actions ont été menées :

- mise en place d'un site de « e-learning » pour la partie du cours qui avait dû être supprimée auparavant, et qui rappelle les notions fondamentales. L'utilisation de cet outil a été étendue aux cours de thermodynamique du master CEP et à l'occasion d'une formation professionnelle auprès d'ingénieurs IFPEN.
- Depuis la sortie de l'ouvrage thermodynamique et de son site associé (voir section 3.3), il est utilisé comme guide et référence dans le cours
- Des déroulés pédagogiques ont été construits pour toutes les séances
- Des quizz ont permis d'évaluer durant les cours la consultation et la compréhension des éléments fournis dans les séances d'e-learning. Cela rend les exposés plus ludiques tout en permettant de se concentrer sur les points essentiels.

L'amélioration peut être visualisée à l'aide des réponses aux questionnaires en fin de cours. Les figures ci-dessous montrent que le contenu a été mieux compris et que la pédagogie a été mieux appréciée, ce qui nous encourage à poursuivre dans cette voie.

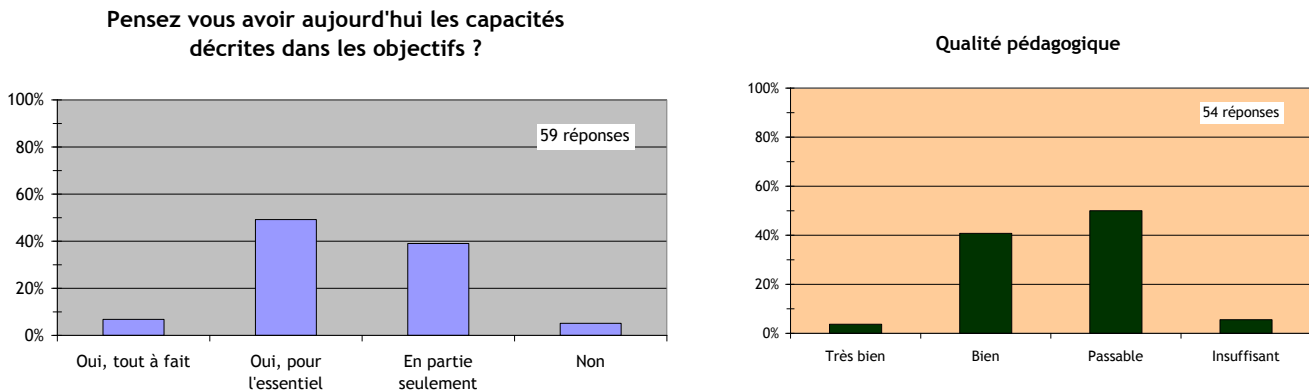


Fig. 2 Réponses aux questionnaires sur l'année scolaire 2011 – 2012

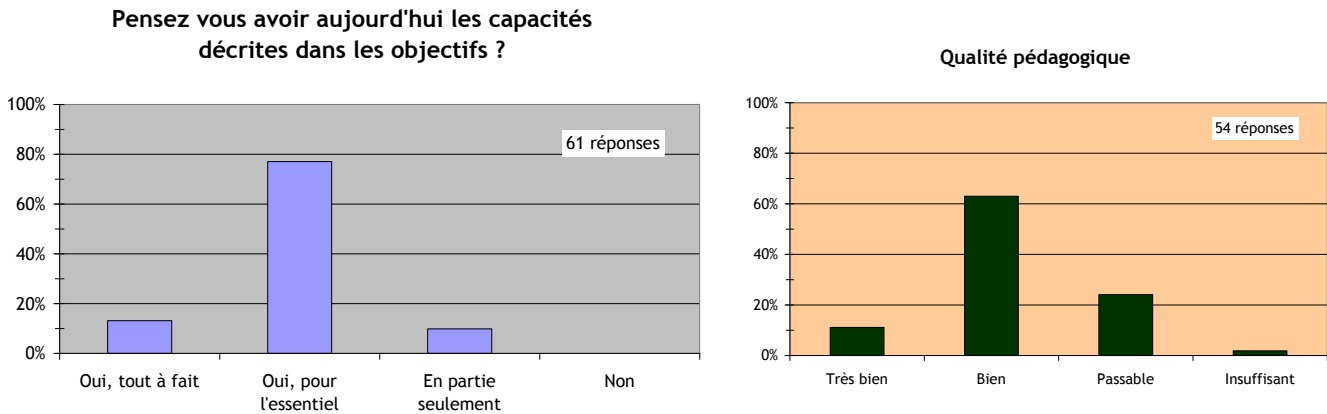



Fig. 3 Réponses aux questionnaires sur l'année scolaire 2012 – 2013

Outre ces développements, qui concernent le premier module (en septembre-octobre), les cas d'études qui avaient été présentés en 2010-2011 ont été repris et mis à jour pour le second module (mars-avril). Ces cas d'étude seront évalués sur base d'un rapport et d'une session poster.

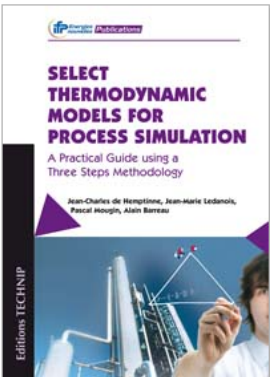
3.3 Rédaction d'un ouvrage « Select thermodynamic models for Process simulation »

L'ouvrage proposé a pour objectif de fournir un guide aux utilisateurs de méthodes de thermodynamique. A ce titre, il pourra également servir pour l'enseignement de ces méthodes dans des écoles d'ingénieurs. Il a été édité aux éditions Technip en avril 2012. Il est associé à un site web où on peut trouver le sommaire, les exercices (avec téléchargement de fichiers excel), et certains passages sous format pdf.

Select thermodynamic models for process simulation
A Practical Guide to a Three Steps Methodology



HOME
CHAPTERS
CASE STUDIES
AUTHORS
Order the book



SELECT THERMODYNAMIC MODELS FOR PROCESS SIMULATION
A Practical Guide using a Three Steps Methodology

Jean-Charles de Hemptinne, Jean-Marie Ledanois, Pascal Mougin, Alain Barreau

Editions TECHNIP

Order the book

Select thermodynamic models for process simulation
A Practical Guide to a Three Steps Methodology

Jean-Charles de Hemptinne, Jean-Marie Ledanois, Pascal Mougin and Alain Barreau

DOI: 10.2516/ifpen/2011001
ISBN: 978-2-90163-813-1
EAN: 9782901638131

The choice of a modelling approach is very often guided by the experience on other systems, or by the availability of parameter databases. This is acceptable in the sense that most industrial computations are based on previous cases that worked correctly. Yet, it may also be dangerous, and it is then recommended to submit the problem to a thermodynamic analysis.

Our purpose is to provide a **vademecum** that should help the practicing engineer in finding the right questions to answer when faced with a novel type of thermodynamic problem: when the questions are correctly stated, the answer is half on its way.

3.4 Projet TERG (Transition Energétique et Responsabilité Globale)

Parmi les autres actions, il faut mentionner la participation au projet TERG dans l'UE « Développement durable et transition énergétique » du programme ENEP. Ce projet porte sur une thématique qui touche l'utilisation de la biomasse. Il est demandé aux étudiants de réaliser une revue bibliographique afin de documenter l'intérêt de développer ou non certaines voies innovantes pour les énergies de demain.

3.5 Suivi d'apprentis

Chaque année, deux ou trois étudiants sont recrutés comme apprentis à IFPEN. J'interviens comme moniteur école dans leur suivi.

4 Actions extérieures

La stratégie d'IFP Energies nouvelles implique également une présence active dans les instances externes, et en particulier les sociétés savantes, avec comme objectif de participer à l'effort de transfert d'informations entre les organismes de recherche et l'industrie. Des actions de la chaire « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse » en 2011 ont été menées sur plusieurs fronts :

4.1 Animation du Groupe de Travail « Thermodynamique et Procédés » de la SFGP

En moyenne, deux journées thématiques sont organisées chaque année depuis la création de ce GT en 2009.

En 2012, la dernière journée thématique était plus particulièrement organisée dans le cadre de la chaire de la fondation Tuck « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse ». Cette journée sur le sujet « Thermodynamique et bioprocédés » a été organisée à l'IFP Energies nouvelles conjointement avec les Groupes de Travail « Thermodynamique et Procédés », « Procédés Biologiques et Agroalimentaires » et « Procédés Séparatifs » de la SFGP. L'ensemble des exposés est disponible sur le site web de la SFGP : <http://www.sfgp.asso.fr/index.php?cat=menu&mcat=group&id=160>

60 participants étaient présents, dont une partie importante venant de l'industrie (Sanofi, Véolia, INERIS, PSA Peugeot Citroën, Total, RSI, L'Oréal, ARD, IFPEN, Lhoist SA, Processium, Ingredia, ProSim SA, ..). Cette forte participation industrielle confirme l'intérêt que portent ces organismes au sujet abordé. Il y a eu 8 exposés sur différentes thématiques liées au sujet, et la journée s'est terminée par une table ronde avec des représentants de l'industrie. Les conclusions indiquent que de nombreuses entreprises cherchent à améliorer leur compréhension des phénomènes de thermodynamique moléculaire afin d'améliorer leurs rendements énergétiques ou de sélectionner des solvants plus 'verts' pour leurs procédés. Un besoin qui est également souvent mentionné est celui d'une formation adaptée pour leurs ingénieurs.

4.2 Représentation de la France dans le groupe de travail européen « Thermodynamics and transport properties »

Comme responsable du GT français, et en tant que titulaire de la chaire « thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse », j'ai été nommé représentant de la SFGP au sein du groupe de travail du même nom dans la fédération européenne de génie chimique (EFCE). Ce groupe a été créé à l'initiative du Professeur Economou, avec les objectifs suivants :

- établir un lien entre les travaux académiques et les outils utilisés dans l'industrie concernant la mesure, le calcul, la simulation et la compréhension des phénomènes en thermodynamique.
- promouvoir la concertation au sujet de l'enseignement de la thermodynamique
- proposer des manifestations permettant les échanges d'idées, de projets et la mise en place de collaborations
- coordonner les actions de recherche et développement en identifiant les systèmes et conditions innovants où des travaux sont nécessaires

Dans le cadre de cette action, le groupe de travail français a organisé les 19 et 20 Mars 2012 à l'ENS de Lyon un séminaire intitulé : « **Industrial Use for Molecular Thermodynamics** » (**InMoTher**).

Cette manifestation a connu un succès qui mérite d'être remarqué : 159 participants venant de 22 pays différents, dont 58 participants industriels. Des sponsors industriels ont donné une légitimité supplémentaire à ce séminaire qui leur était dédié (TOTAL, Air Liquide, Linde, BASF, Rhodia, IFP Energie nouvelles, le pôle régional Axelera, CNRS).

Le séminaire était organisé autour de trois grandes thématiques (Simulation moléculaire, Simulation macroscopique – équations d'état et gestion de données expérimentales), avec une intervention académique plénière faisant l'état de l'art, et deux interventions industrielles pour chaque grand thème. La dernière session était une table ronde animée par un représentant de Rhodia et un représentant de TOTAL.

Un numéro spécial OGST est dédié à ce séminaire, et sera introduit par une analyse²⁹, en particulier de la table ronde qui a permis d'identifier des verrous à lever dans la collaboration entre le monde académique, l'industrie et les vendeurs de logiciel, qui sont intermédiaires entre les derniers développements de la recherche et la mise à disposition pour le calcul de procédés.

Lors de la réunion annuelle du Groupe de travail européen, il a été décidé que le séminaire InMoTher aura une suite, dont le nom sera modifié (IUT pour Industrial Use of Thermodynamics) lors du prochain congrès ESAT qui se tendra à Eindhoven en juillet 2014. Je reste le responsable scientifique de ce séminaire.

4.3 Autres congrès

Il est utile de rappeler que la participation financière de IFPEN au congrès Thermodynamics 2011 (Athènes, les 29 Aout – 1 septembre 2011) a été l'occasion de mettre en avant la chaire de la fondation Tuck dans le cadre d'une session qui lui était dédiée.

4.4 Visiteurs invités

Dans le cadre de la chaire, plusieurs professeurs de renom international ont pu être invités :

4.4.1 Prof. Kontogeorgis (DTU, le 23 septembre 2011)

Le professeur Kontogeorgis, responsable d'une équipe à l'université technique du Danemark et auteur d'un ouvrage très documenté sur les nouveaux modèles en thermodynamique ; il est le directeur de thèse de notre doctorant qui travaille sur la caractérisation de la biomasse. Il nous a rendu visite le 23 septembre et a fait une présentation sur le sujet des modèles thermodynamiques pour différents types de systèmes.

4.4.2 Prof. Galindo (Imperial College, London, le 8 septembre 2011)

²⁹ G. Kontogeorgis, J-N Jaubert, J-C de Hemptinne : « Workshop on Industrial use of Molecular Thermodynamics (InMoTher) » 2013, To be published, OGST

Le professeur Galindo fait partie de l'équipe de génie chimique qui développe des méthodes nouvelles pour regrouper les actions en simulation moléculaire et simulation classique. Leur développement de l'équation d'état SAFT à partir de potentiels innovants est reconnu pour être le plus rigoureux. Le professeur Galindo participe à l'encadrement d'une thèse à IFPEN sur la thématique de SAFT avec des électrolytes en vue de la description de mélanges d'amines pour l'absorption du CO₂.

Son exposé s'intitulait « Advances in SAFT Approaches from the Molecular Systems Engineering Team at Imperial College ».

4.4.3 Prof. L. Vega (U. Barcelone, le 11 avril 2012)

Le professeur Vega, directeur du laboratoire MatGas à l'université de Barcelone est à l'origine d'une version de SAFT originale, nommée 'Soft-SAFT'. Le principe en est que le terme de sphère est directement développé à partir d'une corrélation de résultats sur des sphères de Lennard-Jones en simulation moléculaire. Elle a appliqué cette approche sur un certain nombre de propriétés importantes, comme la tension interfaciale ou le point critique. Des réflexions sont en cours en vue d'établir une collaboration avec son équipe.

5 Conclusions

La chaire « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse » a permis de regrouper un certain nombre d'actions qui présentent ainsi une cohérence d'ensemble.

Elle permet de

- proposer des actions de recherche qui soient résolument orientées vers les applications industrielles ;
- renforcer le lien IFP-School / R&D ;
- donner une visibilité externe aux actions entreprises à IFP Energies nouvelles.

De nombreuses actions sont menées dans ce cadre :

- Acquisition de données expérimentales,
- Compréhension des phénomènes complexes à l'aide de la simulation moléculaire,
- développement d'une équation d'état,
- paramétrage de cette équation d'état,
- mise à disposition de cette équation dans des outils de calcul conviviaux,
- développement d'une nouvelle pédagogie pour adapter l'enseignement aux conditions de temps limité et de besoin d'application que les élèves ressentent beaucoup plus aujourd'hui,
- rédaction d'un ouvrage pour faciliter le choix des modèles dans le cas de systèmes complexes,
- animation de séminaires français et européens afin de faire connaître nos actions et créer des liens avec les différentes équipes partenaires.

Toutes ces actions ont comme objectif d'améliorer le rayonnement d'IFPEN autour des systèmes bio-sourcés en vue de faciliter l'émergence de nouveaux procédés et de nouvelles applications, mieux optimisés et plus sobres en matière première et en énergie.