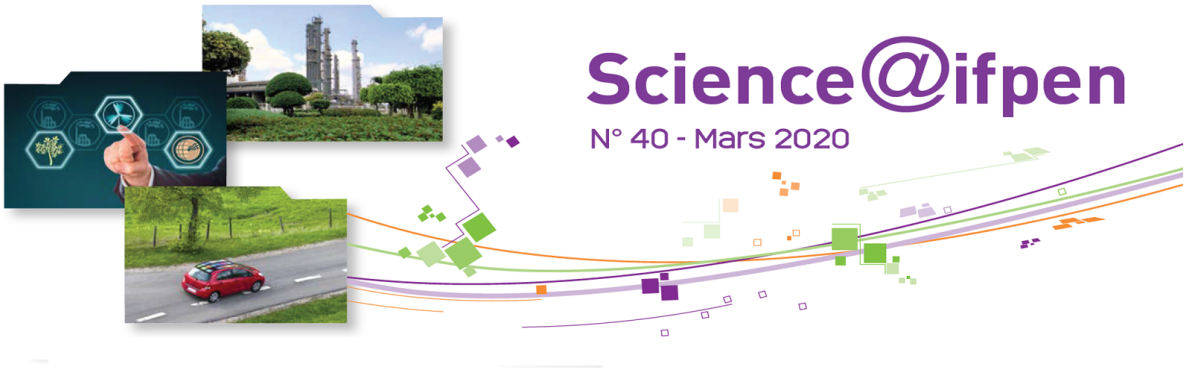


Rédigé le 04 mars 2020

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Sciences de l'ingénieur **Génie chimique et génie des procédés**



Le groupe IFPEN déploie sur le marché mondial des procédés pour le recyclage des plastiques, la capture du CO_2 et la production de bioproduits, tout comme pour le raffinage ou la pétrochimie. Émergents ou matures, tous ces secteurs exigent des innovations pour diminuer leur impact environnemental, améliorer leur compétitivité et avancer vers la transition énergétique.

La raison d'être de la direction Conception Modélisation Procédés est la **maîtrise du risque d'extrapolation à l'échelle industrielle de concepts et d'idées** initialement vérifiés à petite échelle. Il s'agit de définir des enchaînements d'étapes unitaires, des règles de dimensionnement, des conditions d'opération et des modes de conduite pour se lancer en confiance dans les étapes de prototypage et d'industrialisation.

La direction s’appuie pour cela sur une recherche fondamentale pluridisciplinaire allant de la **cinétique** à l’**hydrodynamique** en passant par les **transferts de matière et d’énergie**, utilisant des données issues de méthodes expérimentales originales et structurée par des approches mathématiques dédiées.

Les articles de ce numéro illustrent l'aller-retour permanent entre science et réalité opérationnelle qui fait le quotidien des chercheurs de la direction.

Bonne lecture !

Pierre Porot,
Directeur Conception Modélisation Procédés

 **Voir le PDF de la lettre**

LES BRÈVES

La production industrielle d'éthanol à partir de biomasse lignocellulosique a été démontrée par le **projet Futurol™**[a]. L'extrapolation et l'optimisation du procédé, ainsi que sa flexibilité vis-à-vis des matières premières, ont nécessité de travailler sur de nombreuses opérations unitaires - dont les plus critiques sont le prétraitement, la **production d'enzymes**, l'**hydrolyse** et la **fermentation** (figure) - mais aussi sur différentes séparations liquide/solide complexes. Sur l'ensemble de ces opérations unitaires, des essais préalables ont été effectués au laboratoire et chez les fournisseurs d'équipements.

Études et choix technologiques ont ensuite été validés sur l'unité pilote située à Pomacle-Bazancourt (Marne), d'une capacité de 1 t/j. L'extrapolation à l'échelle industrielle de la technologie de prétraitement a aussi été confirmée à une taille supérieure (100 t/j) sur l'unité IPX située à Bucy-le-Long (Aisne). De même, pour l'extrapolation de la production d'enzymes, des essais à taille industrielle (180 m^3) ont été menés sur l'unité BioDémo d'ARD.

De multiples actions de recherche fondamentale, notamment au travers de travaux de thèse[b], ont été conduites à IFPEN pour mieux comprendre les phénomènes à l'oeuvre dans ces différentes opérations unitaires. En particulier, des études sur l'hydrodynamique et la réaction ont été menées sur les bioréacteurs que ce soit dans le cadre de l'hydrolyse enzymatique(1) ou de la production d'enzymes(2).



Pilote Futurol™ - Atelier hydrolyse et fermentation.

L’étude sur l’hydrolyse enzymatique a permis de mieux prendre en compte la variabilité des types de biomasse et de l’impact des conditions de prétraitement. Pour l’étude sur la production d’enzymes, une méthodologie *scale-down* a permis de reproduire, à l’échelle du laboratoire, les contraintes et les spécificités rencontrées dans les fermenteurs industriels.

a - https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/article/bioethanolavance-en-route-vers-commercialisation-technologiefuturol

b - M. Chauve (2011), J-C. Gabelle (2012), E. Jourdier (2012), M. Huron (2014), N. Hardy (2016)

---

(1) S. Boivineau, R. Rousset, P. A. Bouillon, F. Battista, M. Gomez Almendros, Bioresource Technology, Vol. 250, February 2018, pp. 191-196.
DOI :10.1016/j.biortech.2017.11.049

(2) C. Plais, D. Marchisio, F. Augier, L. Gemello, V. Capello, Chemical Engineering Research & Design, Vol. 136, August 2018, pp. 846-858.
DOI : 10.1016/j.cherd.2018.06.026

Contacts scientifiques : romain.rousset@ifpen.fr / Frédéric Augier

>> NUMÉRO 40 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Innovation et industrie

Actualités mars 2020

Biocarburants de 2e génération : une première industrielle pour la technologie française Futurol™

Communiqués de presse

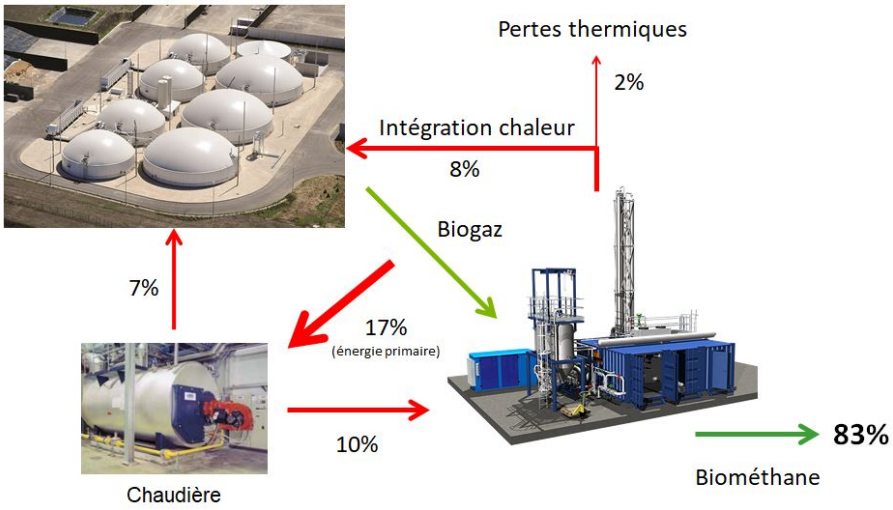
Énergies renouvelables | Biocarburants et e-fuels | Hydrocarbures responsables

Extrapoler les technologies de production d’éthanol à partir de biomasse

En collaboration avec la société Arol Energy, une nouvelle technologie de **purification du biogaz issu de la méthanisation** a été développée pour en extraire le méthane (CH_4) et l'injecter dans le réseau. Ce procédé utilise un **solvant aux amines** développé par IFPEN pour le captage du CO_2 dans le biogaz et présente une efficacité énergétique supérieure aux solutions membranaires classiques.

Le développement s'est appuyé sur les connaissances acquises en traitement de gaz(1) et en captage du CO_2, transposées au biogaz[a] en intégrant ses spécificités(2). Le procédé produit ainsi un gaz à 97,5 vol% de CH_4 répondant aux spécifications des réseaux de distribution. Pour y parvenir, un outil de calcul a été développé pour simuler la colonne d'absorption en intégrant les modèles d'équilibres, les propriétés physico-chimiques, les corrélations de transfert de matière, ainsi que les mécanismes réactionnels associés au nouveau solvant, autant de données issues d'expérimentations à petite échelle.

De plus, pour améliorer le dimensionnement de l'absorbeur avec ces données, une approche originale a été choisie pour **modéliser le transfert réactif**, permettant de découpler les phénomènes de diffusion et de réaction. Cela a consisté à discrétiser les équations au sein du film liquide, proche de l'interface avec le gaz, là où l'ensemble des phénomènes de transfert de masse est censé se tenir.



Intégration thermique et utilisation du nouveau solvant IFPEN (source : Arol Energy).

Sur l'unité industrielle de démonstration, une intégration énergétique[b] poussée a permis de proposer un procédé innovant et compétitif en termes de taux de biogaz valorisé ; le rendement en biométhane de l'unité passant de 69 % à 83 %(3).

a - Disponible à pression atmosphérique ; composition 50 vol% CO_2 - 50 vol% CH_4
b - Approche globale, à l'échelle d'un procédé ou d'une usine, en vue d'optimiser l'utilisation de l'énergie

(1) M. Meyer, L. Hegely, P. Alix, J. Roesler, D. Rouzineau, AIChE Journal, Vol. 63, No 8, 2017, pp. 3246-3275.
DOI : 10.1002/aic.15737

(2) C. Peregrina, E. Flottes, P. Collet, L. Raynal, S. Capela, H. Pierre, A. Favre, Applied Energy, Vol. 192, 15 April, 2017, pp. 282-295.
DOI: 10.1016/J.APENERGY.2016.08.181

(3) J. Grandjean, A. Wender, K. Lettat, M. Dehlinger, J. Roesler, S. Gonnard, V. Carlier, Poster Presentation, 69th LRGCC, 2019.

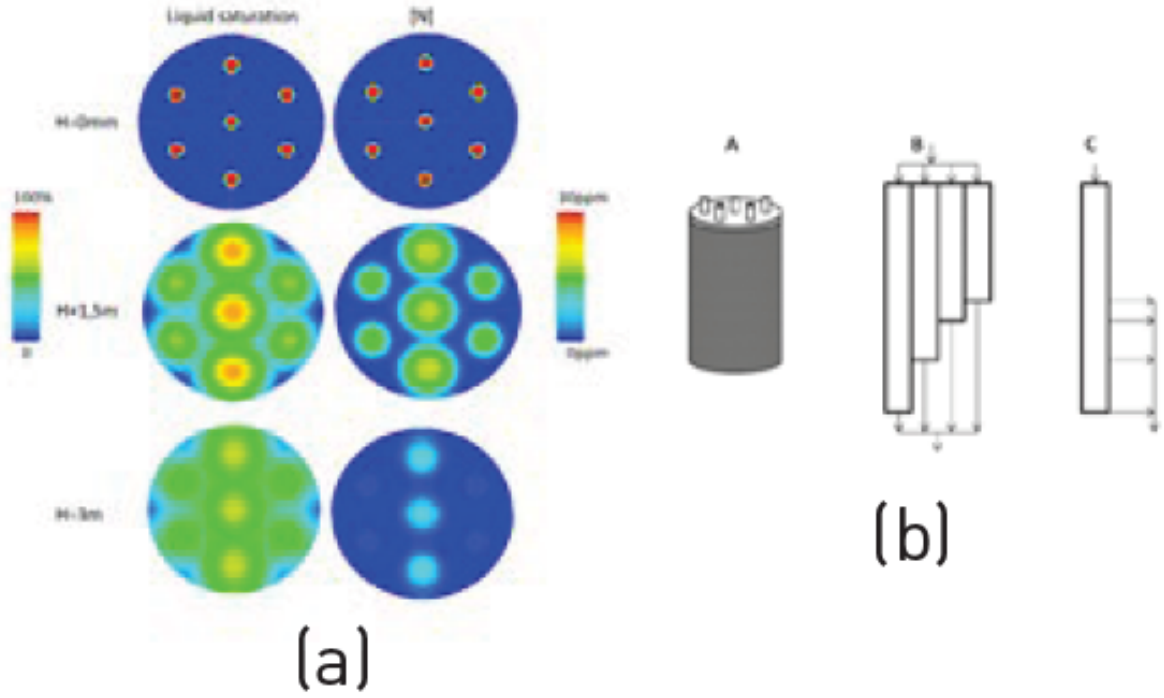
Contacts scientifiques : kader.lettat@ifpen.fr - Ludovic Raynal

>> NUMÉRO 40 DE SCIENCE@IFPEN

Une première mondiale d'intégration énergétique : chaleur et gaz à tous les étages

L’amélioration des procédés chimiques passe régulièrement par l’introduction de nouvelles géométries d’internes dans les réacteurs. Classiquement, les modèles de réacteurs en lit fixe utilisent une description trop simple de l’hydrodynamique, selon une configuration de réacteur de type « piston ». Cette description trouve ses limites lorsque l’on cherche à modéliser certaines technologies spécifiques et leur impact sur les performances des procédés.

Coupler une hydrodynamique complexe avec des modèles cinétiques eux-mêmes complexes interdirait leur incorporation dans des codes CFD, sauf au prix de temps de calcul rédhibitoires. Pour les besoins de la simulation des réacteurs, il a donc fallu mettre au point une **méthodologie permettant d’obtenir une modélisation suffisamment représentative de l’hydrodynamique**, et compatible avec l’utilisation de modèles cinétiques complexes. Pour ce faire, une approche rigoureuse a été utilisée pour se donner une représentation 1D de l’impact de l’hydrodynamique à partir de simulations 3D en CFD. Pour construire ces modèles monodimensionnels tenant compte de l’hydrodynamique, on a eu recours à la **théorie de transport des âges internes**[a] dans le réacteur.



(a) Évolution de fraction liquide et de réactif le long d’un réacteur Trickle Bed d’hydrotraitement.
(b) Illustration du principe de calcul 1D.

À titre d’exemple, un modèle diphasique Euler-Euler a été employé pour modéliser un réacteur à lit fixe (figure), sujet à une mauvaise distribution de liquide du fait de l’obturation partielle d’un plateau distributeur[(1)]. Afin d’évaluer l’impact de cette avarie sur les performances réactionnelles, dans le cas d’un hydrotraitement, des simulations de transport d’espèces chimiques ont été effectuées. Au final, le modèle 1D piston-dispersion multisortie fournit une excellente prédiction des performances,

équivalente aux simulations complexes 3D du réacteur.

a - qui consiste à calculer l'âge moyen des molécules en tout point du réacteur

---

(1) M. Fourati, F. Augier, Y. Haroun, Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 95, No 2, 2017, pp. 222-230.
DOI 10.1002/cjce.22618

Contact scientifique : yacine.haroun@ifpen.fr

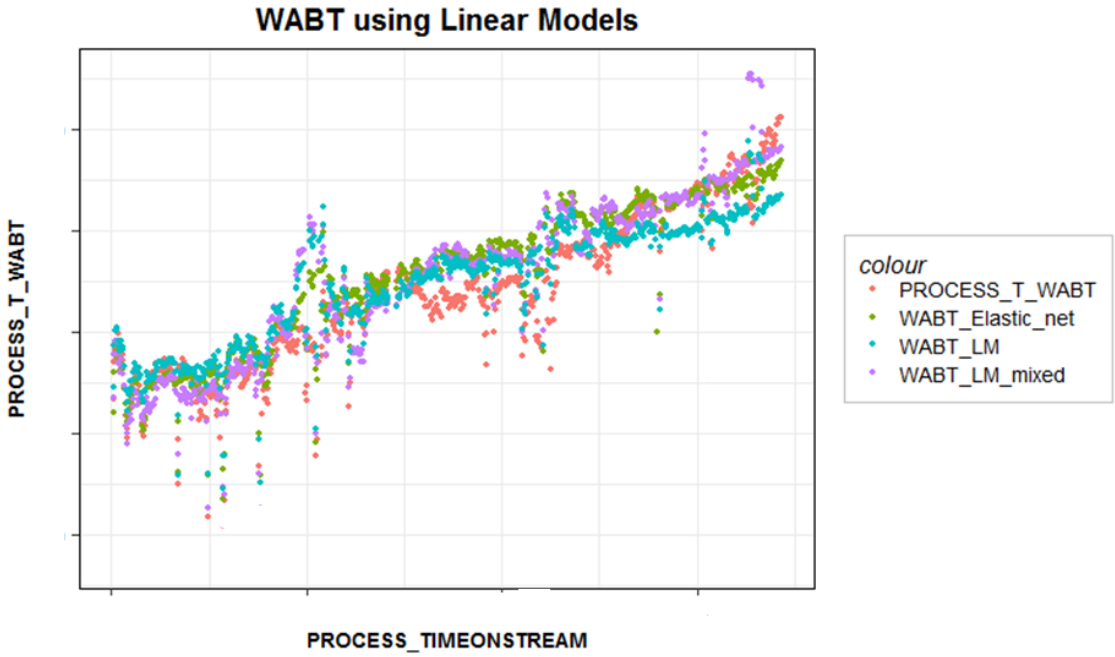
>> NUMÉRO 40 DE SCIENCE@IFPEN

Pour simuler les réacteurs, l’hydrodynamique ça compte !

Disposer de modèles cinétiques de plus en plus précis et robustes en extrapolation pour prédire certaines propriétés[a] reste un enjeu majeur des procédés comme l'hydrotraitement et l'hydrocraquage du distillat sous vide (DSV). Pour les modèles couramment utilisés, simples ou complexes, l'objectif est de déterminer les descripteurs pertinents en conciliant deux contraintes antagonistes : d'une part, un besoin de complexité pour accepter de larges variations dans les charges entrant dans le procédé et, d'autre part, la rareté des données industrielles et leur inadaptation, car généralement limitées aux propriétés macroscopiques.

Une approche originale a consisté à **utiliser les techniques de *machine learning* pour identifier ces descripteurs clés**(1), en y ajoutant de l'information a priori sur la forme et les paramètres des modèles cinétiques, de manière à garantir la réalité physique du modèle(2). Cette approche est proposée aussi bien pour le design des réacteurs que pour prédire l'évolution de l'activité du catalyseur au cours d'un cycle industriel. Dans ce cas, le temps sous charge (TOS : *Time on Stream*) et l'historique[b] du catalyseur doivent être intégrés.

Dans le modèle développé, la variation de la propriété à prédire est le produit d'une fonction empirique des propriétés de la charge - mais également, si nécessaire, du TOS et des conditions opératoires passées - et de la fonction décrivant le modèle cinétique, incluant d'éventuels termes d'inhibition.



Température moyennée des réacteurs (WABT c) en fonction du temps sous charge (TOS) (Process_T_WABT = température mesurée)

La qualité prédictive obtenue est illustrée au travers de l'évolution de la température en fonction du temps sous charge (figure). Cette méthodologie permet d'obtenir des modèles suffisamment précis et robustes pour être utilisés industriellement, pour la conception de nouvelles unités ou pour le remplacement de catalyseurs. Elle pourrait être étendue à d'autres procédés.

a - Teneur en azote ou en soufre, degré de conversion, température du réacteur, etc.
b - Températures, pressions, charges traitées, etc.
c - *Weighted Average Bed Temperature*

---

(1) J. J. Da Costa, F. Chainet, B. Celse, M. Lacoue-Nègre, C. Ruckebusch, N. Caillol, D. Espinat. Energy Fuels 2017,
DOI : 10.1021/acs.energyfuels.7b03266.

(2) P. J. Becker, N. Serrand, B. Celse, D. Guillaume, H. Dulot. Fuel 2016, 165, 306–315,
DOI : 10.1016/j.fuel.2015.09.091.

Contact scientifique : benoit.celse@ifpen.fr

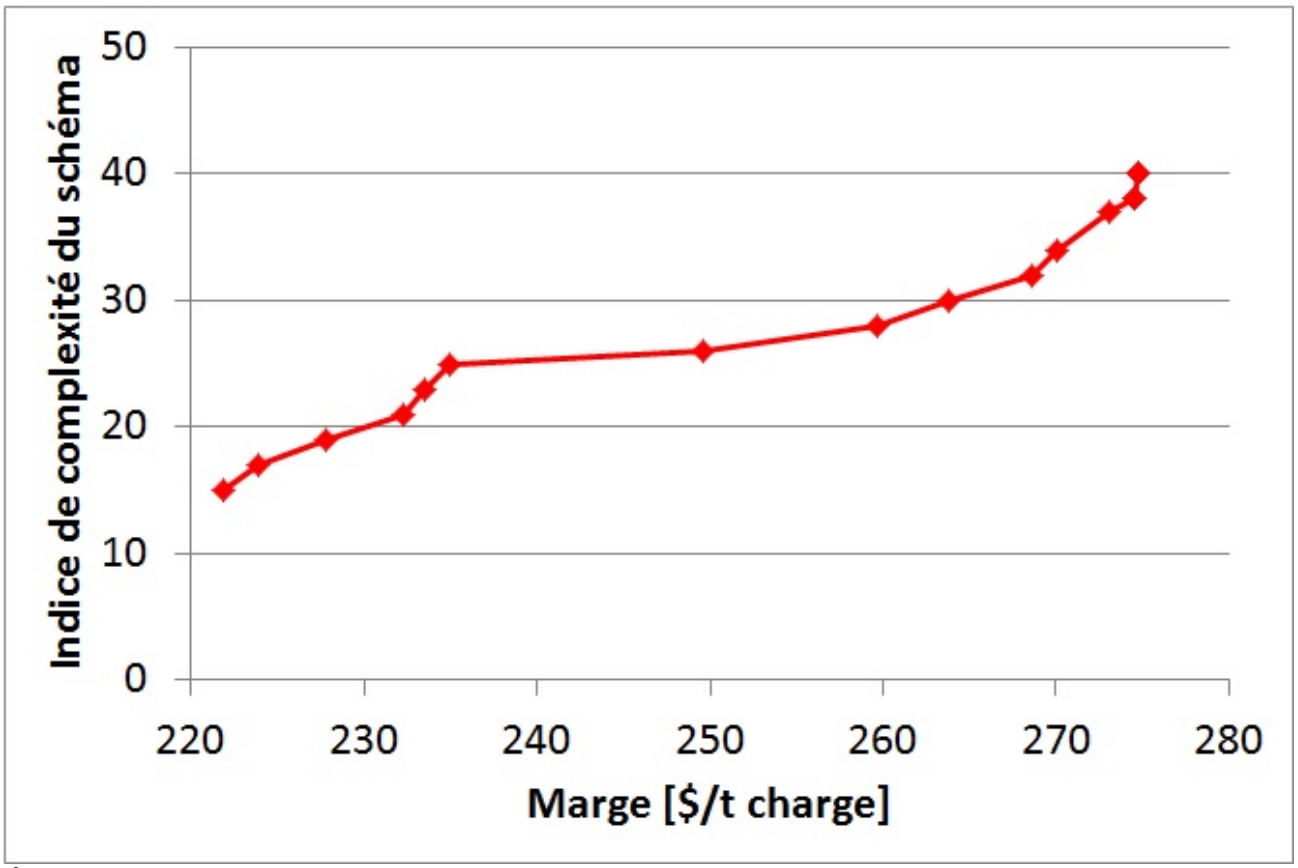
>> NUMÉRO 40 DE SCIENCE@IFPEN

Les modèles cinétiques font leur apprentissage

Afin de tirer le meilleur parti d'installations très coûteuses, le développement des procédés industriels doit tenir compte de l'intégration entre unités, à la fois pour les développements sur les sujets matures et comme prérequis sur les nouveaux sujets (bioproduits, complexes pétrochimiques).

La **synthèse automatique** - associant choix des briques technologiques, routage des flux entre elles et étape d'optimisation - est une approche scientifique qui permet de répondre à ces besoins. Conceptualisée dans les années 70, elle a du mal à aboutir à cause de la complexité des optimisations avec des variables décisionnelles (binaires). Les techniques d'optimisation basées sur la modélisation détaillée du problème sont très limitées. En outre, réduire la complexité du système par le recours à un méta-modèle[a] global ne résout que très partiellement les limitations induites par les techniques d'optimisation avec variables mixtes.

IFPEN a adopté une **approche faisant appel aux solveurs MINLP**[b] les plus avancés qui permettent de **prendre en compte des variables binaires**. La démarche repose sur la décomposition du problème en blocs représentés par des méta-modèles simples(1). Pour les unités de conversion, l'enjeu a été de réduire la complexité des modèles tout en gardant leur représentativité. Par ailleurs, la séparation des effluents a été conceptualisée en ne tenant compte que des points de coupes[c], sans considération énergétique(2).



Évolution de la marge d'un ensemble de procédés en fonction de sa complexité.

Cette nouvelle approche permet la synthèse automatique et l'optimisation d'un ensemble de procédés, avec des gains économiques à la clé (figure) et ouvre des perspectives pour intensifier les études de schémas d'enchaînement de procédés. Toutefois, la séparation des effluents est encore

traitée de façon trop sommaire dans l'outil et l'effort actuel porte sur une meilleure prise en compte des différents types d'unités de séparation : extraction liquide/liquide, par solvant ou en lit mobile simulé.

a - Réseau de neurones, krigeage
b - *Mixed Integer Non Linear Programming*
c - Seuil de séparation des composés chimiques

---

(1) L. Mencarelli, A. Pagot, P. Duchene. Computers and Chemical Engineering, décembre 2019.

(2) L. Mencarelli, A. Pagot. Escape30, Milan 24-27 mai 2020.

Contact scientifique : alexandre.pagot@ifpen.fr

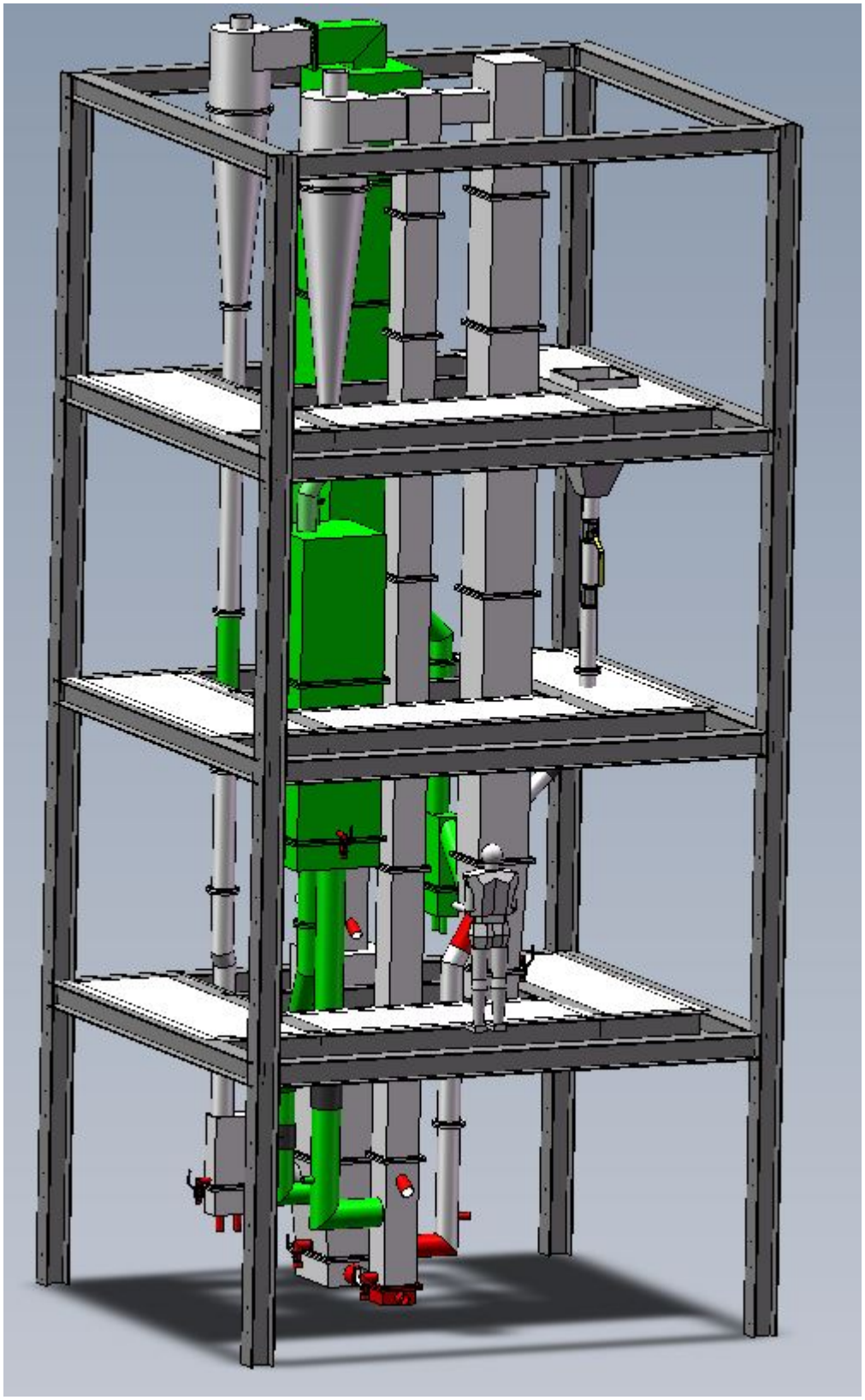
>> NUMÉRO 40 DE SCIENCE@IFPEN

L'efficacité des procédés : une question d'intégration !

La combustion en boucle chimique (*Chemical Looping Combustion* - CLC) est une technologie de combustion sans air, utilisant des matériaux transporteurs d'oxygène (MTO) qui circulent entre deux zones réactionnelles d'oxydoréduction. La séparation en deux zones permet une combustion sans azote qui génère un effluent uniquement constitué de CO_2 et de vapeur d'eau, facilement séparables.

La majorité des recherches sur la CLC a été conduite sur des pilotes de petite taille (<150 kW). Ce fut le cas du développement des zones réactionnelles au sein d'IFPEN, avec des maquettes à différentes échelles et un pilote de 10 kWth[a] ayant permis de caractériser la cinétique de combustion en fonction de la charge et du MTO[(1)].

Toutefois, pour préparer l'extrapolation industrielle[(2)], la démonstration à plus grande échelle (> au MW) est nécessaire, dans des conditions hydrodynamiques et réactionnelles représentatives où peuvent être relevés les principaux défis de la technologie :
• **extrapolation et optimisation** des zones réactionnelles et minimisation des pertes énergétiques ;
• **circulation contrôlée** et stable du MTO entre les réacteurs ;
• **performance des différents MTO** sur un très grand nombre de cycles d'oxydoréduction ;
• **maîtrise de l'étanchéité** entre les deux zones réactionnelles pour éviter les fuites.



Maquette de 1,5 MWth de la boucle entière opérée pour différentes conditions de flux de solide et de gaz.

Le **projet collaboratif sino-européen Cheers**[b] vise à construire et opérer un démonstrateur de 3 MW, basé sur un concept innovant[c] destiné à **valoriser des résidus de l'industrie pétrolière**

comme charges. Récemment, une maquette (figure) de taille équivalente à une unité de 1,5 MWth de l'ensemble de la section réactionnelle a été construite et opérée en Chine pour étudier l'hydrodynamique de chaque section, l'efficacité de séparation entre les imbrûlés de la charge solide et le MTO, et le contrôle de la circulation du solide.

a - kW thermique
b - Chinese European Emission Reduction Solutions
c - Développé avec Total

---

(1) A. Lambert, A. Tilland, W. Pelletant, S. Bertholin, F. Moreau, I. Clémençon, M. Yazdanpanah, Fuel 216 (2018): 71-82.
DOI : 10.1016/j.fuel.2017.11.115

(2) T. Gauthier, M Yazdanpanah, A. Forret, B. Amblard, A. Lambert, S. Bertholin, Powder Technology 316 (2017): 3-17.
DOI : 10.1016/j.powtec.2017.01

Contact scientifique : sina.tebianian@ifpen.fr

>> NUMÉRO 40 DE SCIENCE@IFPEN

Tourner en boucle… oui mais pour une énergie propre

Numéro 40 de Science@ifpen - Conception Modélisation Procédés
04 mars 2020

Lien vers la page web :