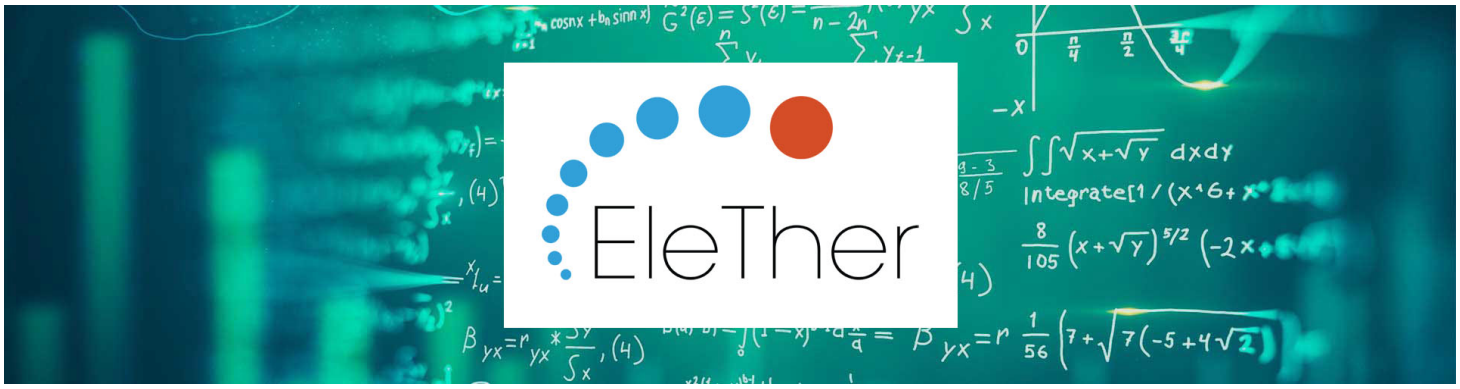


Rédigé le 16 décembre 2021

2 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Sciences physiques | Thermodynamique / Modélisation moléculaire

La thermodynamique des électrolytes représente l'un des principaux défis rencontrés dans le cadre du développement de nombreux procédés industriels. Pour contribuer à le relever, le JIP EleTher avait pour objectif de créer une communauté d'échanges et de pratiques sur la modélisation des électrolytes. Après trois ans de collaboration et de recherche, des progrès significatifs ont été réalisés dans la compréhension des fluides contenant des espèces électrolytiques.

Contexte : les mélanges de fluides contenant des ions doivent être mieux compris

De nombreuses applications dans l'industrie des procédés utilisent **des fluides qui contiennent des espèces électrolytiques**. Cependant, si les modèles thermodynamiques pour les molécules neutres sont maintenant bien établis, il reste encore de nombreuses inconnues liées à **la présence d'ions dans un mélange fluide**.

- Il n'y a pas de consensus au sein de la communauté scientifique sur le meilleur modèle à utiliser pour les interactions combinées à longue et courte distances. Les modèles industriels utilisés à

ce jour comportent souvent un très grand nombre de variables.
- La présence d'un équilibre chimique implique la nécessité de travailler avec des algorithmes réactifs recherchant un minimum global (de phase et chimique).
- Plusieurs phases peuvent coexister (plusieurs liquides en plus de la vapeur et plusieurs solides). Cela implique une analyse rigoureuse de la stabilité de la phase.
- Compte tenu de la complexité des systèmes industriels, les données sont souvent insuffisantes, ce qui signifie que des méthodes d'extrapolation des données peuvent être nécessaires.

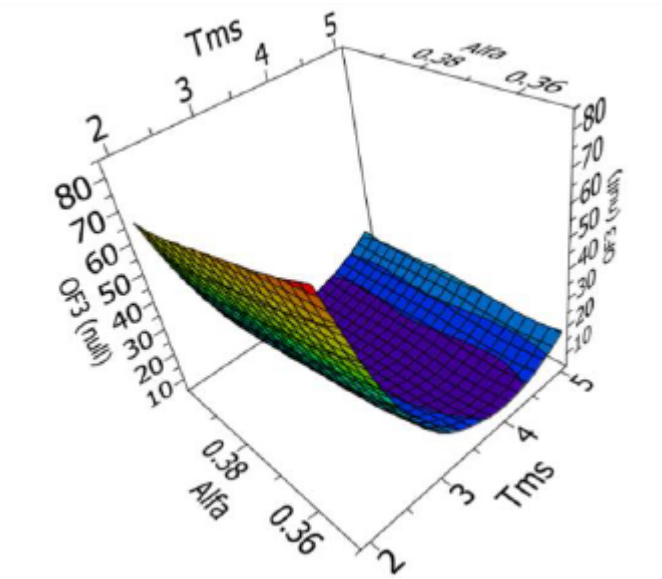
Un procédé en trois étapes : collecte des données, extrapolation des données, paramétrage du modèle avec analyse de sensibilité

Pour répondre à ces enjeux, **sept industriels ont rejoint le JIP (*Joint Industry Project*) EleTher**, lancé en 2019 par IFPEN pour une durée de trois ans. Au-delà des travaux techniques, le consortium avait pour but de créer une communauté industrielle promouvant la recherche sur ce sujet.

La première étape de ce travail de partage et de dissémination a ainsi été la création du site internet d'EleTher. Parmi les autres actions, on peut citer la participation active au symposium "*Industrial Use of Thermodynamics*" (IUT) qui s'est tenu lors de la conférence ESAT 2021, une contribution à un webinaire '*Spotlight Talk*' ("*Electrolyte Thermodynamics challenges from industrial needs to academic research*" - voir le replay en anglais) organisé par la Fédération européenne de génie chimique (EFCE), et la publication d'une communication scientifique dans le *Journal of Chemical & Engineering Data* ("*Data Analysis for Electrolyte Systems: A method illustrated on alkali halides with water*").

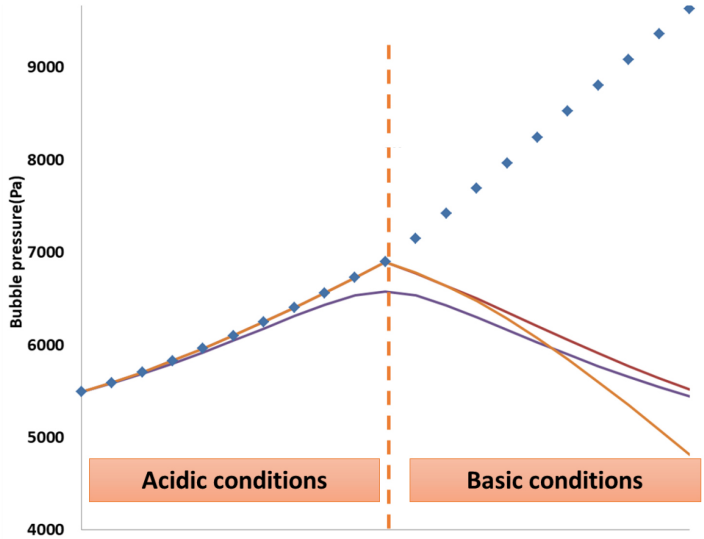
Le travail technique s'est déroulé en trois étapes :

1. Collecte de données : les données sont essentielles au développement du modèle, mais elles peuvent être incohérentes ou hors de la gamme d'intérêt industriel. Une analyse de cohérence est donc essentielle.
2. Extrapolation des données existantes aux conditions d'exploitation industrielle : les tendances pouvant être identifiées dans les données **doivent être extrapolées**, généralement bien au-delà des limites raisonnables. Cela nécessite des suppositions éclairées reposant sur une compréhension des phénomènes physiques en cause. Des modèles moléculaires avancés peuvent être utilisés à cette fin, mais les limites de ces outils doivent être respectées.
3. Une fois que le comportement réel du fluide dans les conditions de fonctionnement est connu, **un modèle industriel doit être paramétré** avant son introduction dans un **simulateur de procédé**. Cela peut devenir un véritable défi lorsqu'il n'existe pas de directives claires car ces modèles peuvent contenir de nombreux paramètres de ce type. Lorsque trop de paramètres sont ajustés sur trop peu de données, le problème devient surdéterminé et impossible à utiliser. Une analyse de sensibilité peut aider à **identifier les paramètres les plus importants**.



Exemple d'une analyse de sensibilité montrant qu'un paramètre (Tms) est plus sensible que l'autre (Alfa)

L'étude des équilibres vapeur-liquide sur des systèmes réactifs a démontré que la présence de nouvelles espèces en solution dans la phase liquide modifiait significativement le comportement de la phase. Un exemple est donné ci-après concernant l'ajout de NaOH sur **la pression de bulle d'une solution** (eau + acide acétique + éthanol).



Résultat des hypothèses de dissociation partielle/totale sur la pression de bulle.
Points : dissociation totale.
Lignes pleines : dissociation partielle (calculée avec des données provenant de différentes sources)

De nouveaux travaux à venir dans un deuxième JIP

Les résultats actuels permettent de conclure que la résolution correcte du problème nécessite souvent des **informations supplémentaires** (spéciation).

D'autres travaux de recherche en ce sens sont prévus, dans le cadre de la chaire EleTher ainsi que dans le cadre d'un nouveau JIP.

D'ores et déjà, les résultats de recherche du JIP pourront être utiles dans plusieurs domaines industriels. Ils peuvent être mis en œuvre pour la compréhension de phénomènes se produisant dans des contextes variés, tels que le traitement de la biomasse, les procédés hydro-métallurgiques pour le recyclage des métaux, ou encore le captage et le stockage du CO_2.

>> En savoir plus : www.elether.fr (en anglais)

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

ESAT 2021 : accès au replay !
ESAT 2021 : accès au replay !

Contact

Jean-Charles DE HEMPTINNE

Professeur IFP-School / Docteur en Génie Chimique
JIP EleTher : une communauté industrielle pour mieux comprendre les modèles thermodynamiques d'électrolytes
16 décembre 2021

Lien vers la page web :