Science @ifpen
N° 55 - Juin 2024

Rédigé le 10 juin 2024

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



Pierre Porot

Directeur de la Direction « Conception Modélisation Procédés »



Frédéric Augier

Adjoint Scientifique de la Direction « Conception Modélisation Procédés »

L’ambition du groupe IFPEN pour les prochaines années consiste à consolider sa position d’acteur majeur de la transition énergétique, de l’économie circulaire et de la décarbonation, en développant des technologies innovantes à la fois vertueuses écologiquement et viables économiquement. Dans ce contexte, la vocation de la Direction *Conception Modélisation Procédés* est d’accompagner la montée en échelle des concepts procédés innovants développés souvent en collaboration avec différentes Directions d’IFPEN ou des partenaires externes.

Ce numéro présente un panorama des compétences hébergées dans la Direction à travers sept articles. Ils illustrent comment les compétences fondamentales du Génie de Procédés ont permis de migrer des activités historiques sur les hydrocarbures vers les nouveaux domaines tels que la synthèse de matériaux de batteries, le captage de CO_2 ou la conversion enzymatique de la biomasse. Certains articles mettent aussi l’accent sur l’usage d’outils de calculs porteurs d’innovation, tels que la Mécanique des Fluides Numérique, le Machine Learning, et les derniers développements liés à la Programmation Linéaire.

En outre, les sujets sélectionnés couvrent une très large gamme d’échelles spatiales (des enzymes aux démonstrateurs industriels) et de TRLs (*Technology Readiness Levels*), et montrent la diversité de compétences, d’outils et de travaux nécessaires aux futurs développements technologiques d’IFPEN.

LES BRÈVES

Dans les procédés de transformation chimique mettant en œuvre une catalyse hétérogène, la phase active, qui accélère les transformations des molécules, est souvent déposée sur un support poreux. Celui-ci est doté d'une surface interne importante, permettant ainsi d'accueillir un grand nombre de sites actifs dans un faible volume. Ce support poreux est très souvent de l'alumine et doit à la fois avoir une tenue mécanique et une résistance thermique adéquates, et favoriser un transfert approprié de masse et de chaleur. Ces propriétés dépendent fortement de la texture du support, laquelle résulte du procédé de fabrication.

Pour les supports en alumine, ce procédé repose sur un phénomène de coagulation : l'assemblage de cristallites primaires de boehmite[a] (de 1 à 5 nm) forme des agrégats très stables (de 10 à 50 nm) qui constituent ensuite des agglomérats (de 100 nm à quelques dizaines de ?m) [1]. En pratique, cette fabrication part d'une poudre de boehmite mélangée avec un acide, sous forme d'une pâte, afin de disperser les grains en petites particules d'agrégats, et ensuite avec une base pour déclencher la coagulation et former des agglomérats. Ce phénomène d'agglomération extrêmement chaotique implique un assemblage à plusieurs échelles de taille, de quelques dizaines de nanomètres à plusieurs microns qui détermine les propriétés finales du support.

Afin de modéliser la structure finale du support d'alumine en fonction des paramètres physicochimiques du milieu, un travail de thèse[b] s'est intéressé à la dynamique de l'agglomération en conditions statiques (absence de forces hydrodynamiques).

Pour quantifier l'impact du pH et de la force ionique, ainsi que de la concentration de boehmite, sur la cinétique d'agglomération, trois techniques expérimentales ont été utilisées : la diffusion dynamique de la lumière (DLS), la diffusion des rayons X aux petits angles (SAXS) et la microscopie électronique à transmission (STEM). Cette approche de caractérisation multi-techniques a permis de mettre en évidence les propriétés structurales à différentes échelles, informations qui ont été exploitées au travers de l'équation du bilan de population, alimentée par un modèle de dynamique Brownienne[c]. Les résultats du bilan de population ont été ensuite utilisés pour paramétrer un modèle morphologique d'agglomération, capable de simuler la structure poreuse finale de l'alumine solide. Un jumeau numérique de la morphologie 3D d'un grain de boehmite après agglomération, au sein d'une suspension colloïdale, a ainsi été créé en prenant en compte des paramètres structuraux tels que la distribution de taille, la dimension fractale[d] et l'ordre d'assemblage.

La microstructure du solide final a été simulée en plusieurs étapes mettant en jeu successivement deux modèles physiques : un modèle de dynamique brownien lagrangien et un modèle de bilan de population.

La première étape a consisté à bâtir un modèle morphologique d'agrégation de cristallites (figure 1). Différentes probabilités d'adhérence ont été attribuées aux points concaves et non concaves d'un agrégat, et reliées à des paramètres physico-chimiques. Le premier modèle a fourni des informations sur la relation entre la dimension fractale et la masse de l'agglomérat, propriété confirmée par les résultats de l'analyse SAXS [2].

Cette relation a ensuite été implémentée dans le modèle de bilan de population, permettant à celui-ci de simuler, de manière réaliste, un système colloïdal de grande taille. Les résultats expérimentaux de

DLS ont été utilisés pour ajuster les paramètres du modèle.

Enfin, la distribution de taille et la dimension fractale obtenues à partir du bilan de population ont été utilisées pour paramétrer le modèle morphologique global et construire un agglomérat d'agrégats en 3D.

Le modèle morphologique développé intègre les conditions opératoires de génération d'une structure 3D adéquate et il pourra faire l'objet de nombreuses améliorations, telles que par exemple la prise en compte de particules non sphériques dans le modèle brownien. En considérant directement des cristallites de boehmite comme des particules primaires plutôt que leurs agrégats, il sera possible à terme de calculer les propriétés texturales du support d'alumine, telles que le volume poreux, la surface spécifique, la distribution des tailles de pores et la tortuosité. Une autre extension possible concernera la prise en compte du cisaillement à des concentrations en solide plus élevées, induisant des phénomènes d'agglomération forcée et de rupture, afin de pouvoir simuler le procédé de fabrication du support aluminique dans des conditions de fonctionnement industrielles.

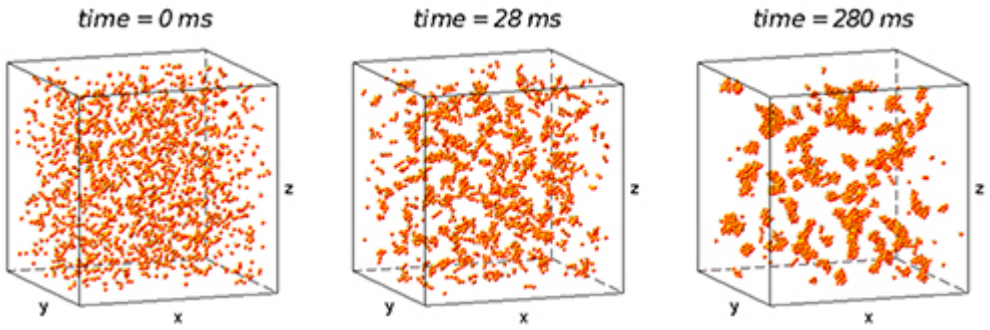


Figure 1 : Evolution d'un système d'agglomérats à l'intérieur d'un volume élémentaire représentatif cubique de 3800 nm d'arête à différents instants, simulée avec un modèle de dynamique brownien.

[a]- Nom commun de l'oxyhydroxyde d'aluminium, oxyde naturel d'aluminium hydraté et constituant des bauxites.
[b]- Thèse de doctorat de G. Ferri : « Identification and study of relevant descriptors of the solid during the synthesis of boehmite », Université Paris-Saclay, 2021.
[c]- Méthode de simulation permettant de décrire la dynamique de particules en interaction dans un environnement qui amortit fortement leur mouvement.
[d]- Cette dimension caractérise la compacité de la structure d'un assemblage de particules. Sa valeur tend vers 1, 2 ou 3 respectivement pour les amas linéaires, planaires et sphériques. Les structures ouvertes ont une faible dimension fractale tandis que les structures compactes ont une dimension fractale élevée.

Références :

1. G. Ferri, S. Humbert, M. Digne, J-M. Schweitzer, M. Moreaud, ***Simulation of Large Aggregate Particles System with a New Morphological Model***, Image Analysis & Stereology, 2021, vol. 40, pp 71-84.
   >> https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/2488

2. G. Ferri, S. Humbert, J-M. Schweitzer, M. Digne, V. Lefebvre, M. Moreaud, ***Mass fractal dimension from 2D microscopy images via an aggregation model with variable compactness***, Journal of Microscopy, 2022, vol. 286, n° 1, pp 31-41.
   >> DOI: https://doi.org/10.1111/jmi.13088

Contact scientifique : jan.verstraete@ifpen.fr

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Modélisation de la fabrication par précipitation - Un besoin pour les supports de catalyseur

Fortes des connaissances acquises sur la synthèse par précipitation de l'alumine pour les catalyseurs hétérogènes, les équipes d'IFPEN se sont lancées sur la synthèse des précurseurs de matériaux actifs pour les cathodes (pCAM[a]) de batteries Li-ion. En effet, ces matériaux aussi sont obtenus par précipitation dans des cuves agitées, ce qui présente certaines similitudes avec la synthèse de l'alumine (phénomènes de nucléation, croissance et agglomération). Ils offrent néanmoins leur lot de défis qui ouvrent autant de nouvelles voies de recherche.

Par exemple, cette opération fait intervenir des réactions extrêmement rapides et des solubilités très faibles, ce qui donne lieu dans le réacteur à des niveaux et des gradients de sursaturation (force motrice de la précipitation) très élevés. Dans ces conditions, l'hydrodynamique et le mélange sur différentes échelles (macro, méso et micro) deviennent les facteurs limitants de la formation du précipité.

Pour la conception et la mise en œuvre du réacteur, il est indispensable de comprendre les différents phénomènes physiques intervenant dans cette synthèse, ainsi que leurs interactions. Cela passe par le développement d'un modèle couplé multiphysique : thermodynamique - cinétique - bilan de population – hydrodynamique. Celui-ci a été initié et mobilisera des compétences dans chacun des 4 domaines en question. A ce jour, les modèles thermodynamiques et cinétiques ne sont pas optimisés et le modèle de bilan de population n'est pas pris en compte (exemple de simulation à la figure 1).

Ce travail sera accompli dans le cadre de deux thèses doctorales, lancées fin 2024, qui visent à caractériser et modéliser les différents phénomènes de formation des particules de précurseurs.

La première thèse, portée par la direction *Physique et Analyse*, vise à capter les phénomènes aux temps courts (nucléation puis croissance des cristaux élémentaires) en mettant au point des méthodes analytiques pour les détecter et les quantifier.

La seconde thèse, hébergée par la direction *Conception Modélisation Procédés*, se focalisera sur la compréhension et la modélisation de l'impact de l'hydrodynamique sur les phénomènes aux temps plus longs (croissance, agglomération, attrition, brisure).

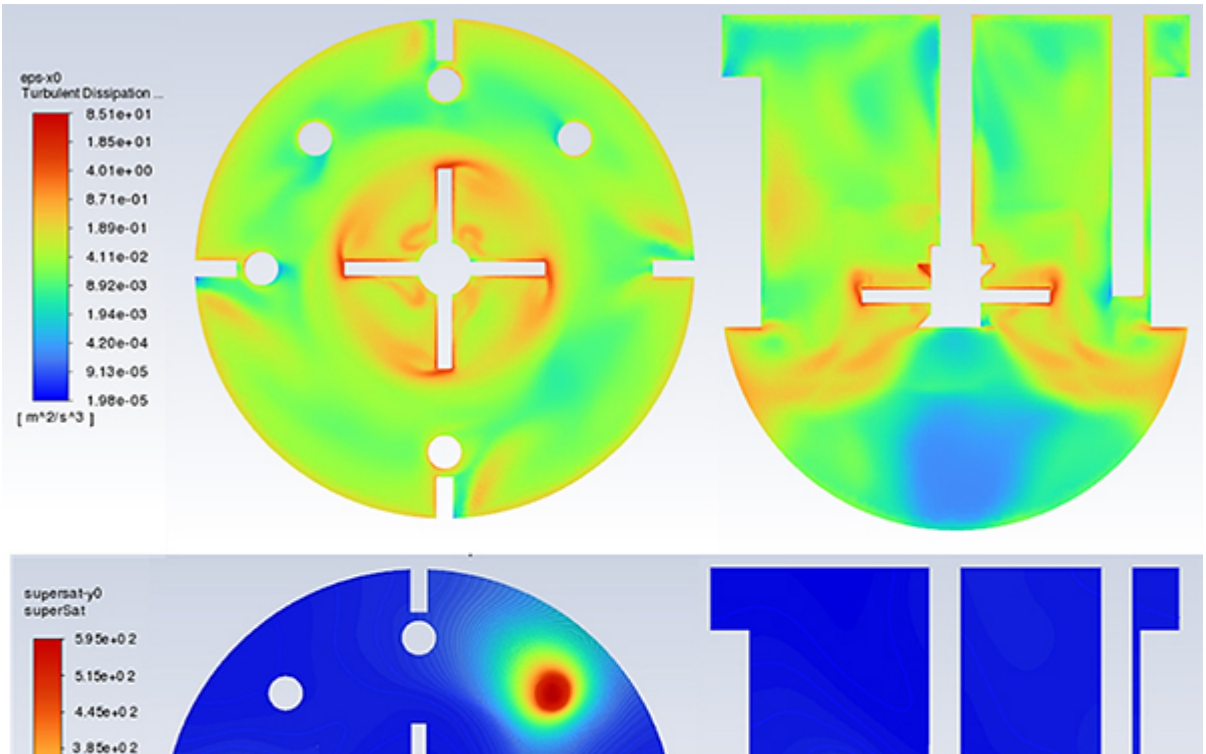


Figure 1 : Champs de taux de dissipation d’énergie turbulente (en haut) et de sursaturation (en bas) dans un réacteur de synthèse pCAM 2L (modèle CFD RANS avec modèle de micro-mélange intégré)

[a]- Precursors of Cathode Active Materials

Contacts scientifiques : jan.verstraete@ifpen.fr - rim.brahem@ifpen.fr

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Modélisation de la fabrication par précipitation - Une compétence pour la production de matériaux pour les cathodes de batteries

Les mousses solides, à base de métaux ou de céramiques, sont des structures poreuses dont l'usage est relativement nouveau dans le domaine des procédés chimiques, et qui sont étudiées à IFPEN depuis quelques années déjà.

De par leur texture 3D, constituée d'une multitude de cavités sphériques juxtaposées (familière dans le domaine de la catalyse hétérogène), ces structures présentent un fort taux de porosité (environ 70-80 %) et une grande surface spécifique. Ceci leur confère a priori de très bonnes performances de transfert externe, que ce soit de chaleur ou de matière. Elles semblaient donc adaptées à des réactions chimiques rapides et fortement exothermiques, telles que des hydrogénations sélectives ou des réactions d'oxydation du méthane. Ceci a ainsi fait l'objet de travaux spécifiques dans le cadre d'une collaboration avec l'université polytechnique de Turin [1], qui ont permis de caractériser le transfert de matière dans des mousses à cellules ouvertes ou OCF « *Open Cell Foams* ».

L'utilisation des OCF a été envisagée par la suite pour la captation de particules en tête de réacteurs d'hydrotraitement pour des charges non conventionnelles (huiles végétales, plastiques recyclés) et a fait l'objet d'un travail doctoral[a] mené en collaboration avec la même université. Le mécanisme de filtration à l'intérieur de galets de mousse a été simulé par la méthode CFD Euler-Lagrange, en utilisant les codes OpenFoam® et Ansys Fluent (Figure 1 gauche) [2], ce qui a permis de déterminer précisément quels descripteurs morphologiques de la mousse impactent l'efficacité de la filtration.

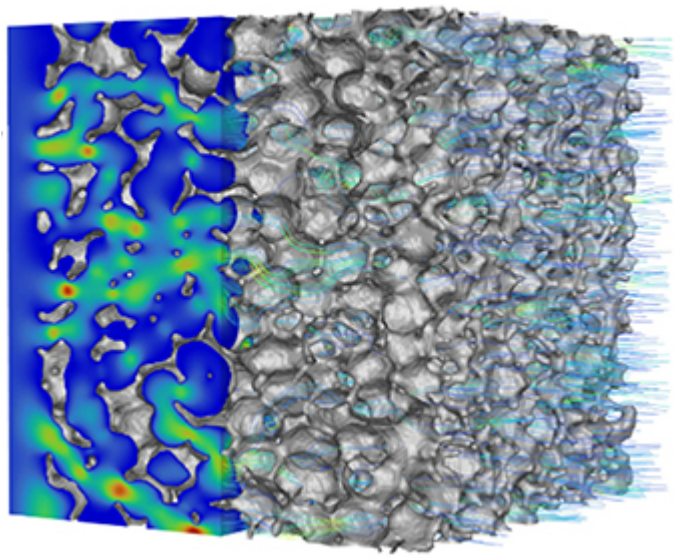


Figure 1 : Jumeau numérique d'une mousse céramique

En parallèle, des essais de captation ont été menés au moyen d'un dispositif expérimental dédié, afin de quantifier l'efficacité de la filtration (hauteur caractéristique de filtration) dans des conditions représentatives d'écoulements ruisselants Gaz-Liquide sur des empilements de galets de mousse industriels.

De nombreuses analyses ont aussi été menées par Tomographie-X[b] pour caractériser le colmatage en mesurant le taux de bouchage des alvéoles sur des mousses usagées, récupérées sur des réacteurs industriels (Figure 2).

En complément, des expériences de colmatage ont été menées au laboratoire, en faisant circuler à travers des galets de mousses un fluide dopé en particules de fer.

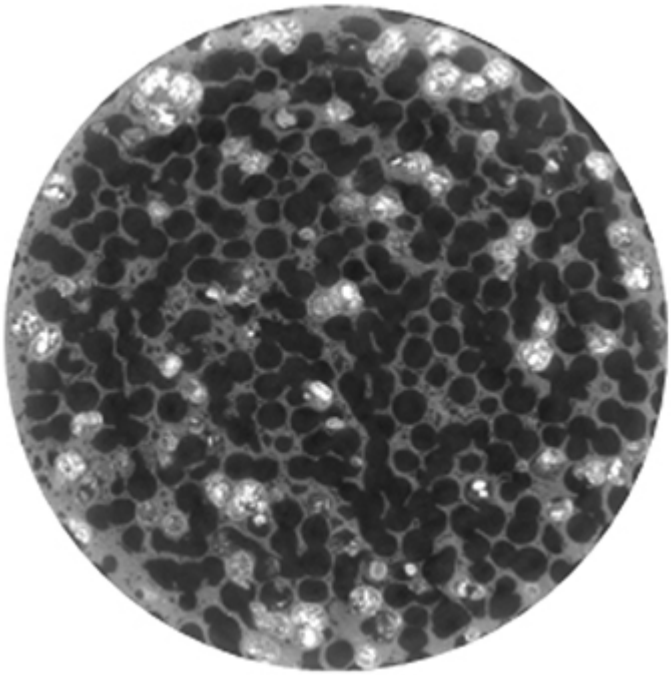


Figure 2 : Observation par Tomographie-X d'un galet de mousse partiellement bouché après usage dans un réacteur en lit ruisselant

Les résultats des expériences de captation et de colmatage de mousses ont été modélisés et intégrés à un simulateur 1D macroscopique de prédiction des performances de captation applicable aux réacteurs catalytiques industriels. Ce modèle global de captation a été validé avec succès, lors de comparaisons avec des expériences menées sur maquette froide et avec des données et bilans matière issus d'unités industrielles.

En définitive, l'ensemble des travaux menés à IFPEN sur les mousses céramiques ou métalliques a montré l'intérêt de ces structures à la fois comme supports catalytiques à hautes performances de transfert(s) et pour réaliser de la captation à très haute capacité. Le savoir-faire acquis durant ces différents travaux ouvre des perspectives en termes d'intensification de certaines réactions rapides, et également en termes d'innovation sur les matériaux de filtrations (OCF) aux géométries optimisées.

[a]- Thèse de Enrico Agostini, *Fluid dynamics and mass transfer in porous media: Modelling fluid flow and filtration inside open-cell foams*, 2023.
[b]- En collaboration avec la Direction *Physique et Analyse* d'IFPEN.

Références :

1. Carmen W. Moncada Quinter, Hernan G. Mazzei, Marion Servel, Frédéric Augier, Yacine Haroun, Jean-François Joly, Stefania Specchia, ***Investigating mass transfer coefficients in lean methane combustion reaction through the morphological and geometric analysis of structured open cell foam catalysts***, Chemical Engineering Science, Volume 281, 5 November 2023, 119138.
   >> https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119138

2. Enrico Agostini, Gianluca Boccardo, Daniele Marchisio, ***An open-source workflow for open-cell foams modelling: Geometry generation and CFD simulations for momentum and mass transport***, Chemical Engineering Science, Volume 255, 29 June 2022, 117583.
   >> https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.117583

Contact scientifique : Frédéric Augier

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Les procédés se font mousser

Dans le secteur de l'énergie et de la chimie, la conversion des matières premières en produits finis ou semi finis se fait par l'enchaînement de procédés qui, au travers d'unités dédiées, comprennent chacun des étapes de conversion des flux entrants et de séparation des produits de sortie (Figure 1).

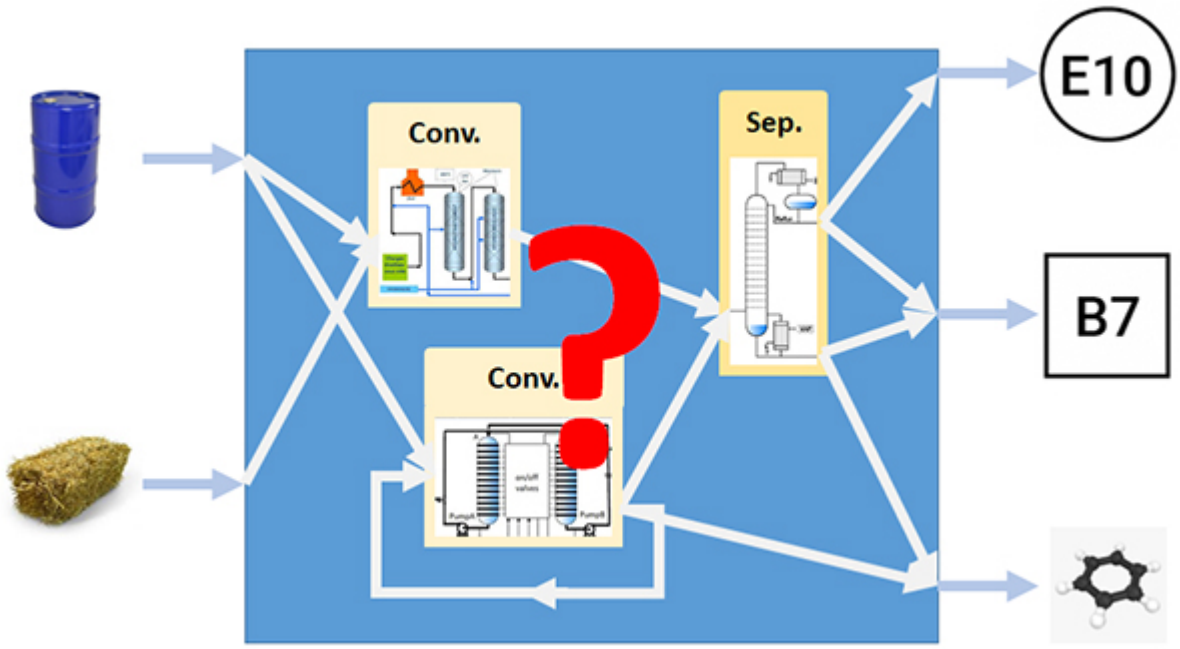


Figure 1 : Problématique de l'optimisation de l'agencement des unités

Dans un contexte industriel où la priorité est mise sur l'optimisation de l'utilisation des ressources et sur la réduction de l'empreinte environnementale, la capacité à redéfinir et à optimiser l'agencement des unités est apparue essentiel à IFPEN qui a développé un outil pour cela.

Dans la littérature, les premières approches mathématiques du sujet ont vu le jour à la fin des années 70 et consistaient à choisir d'un côté les étapes unitaires de conversion et de séparation à mettre en œuvre et de l'autre le routage des flux entre charges, étapes unitaires et produits. Les solutions les plus performantes qui en sont issues reposent sur l'utilisation de solveurs dit MINLP (Mixed Integer Non Linear Programming) lesquels permettent l'emploi de variables aussi bien continues que booléennes. Ces dernières sont en effet nécessaires au niveau de la formulation mathématique pour gérer la notion d'existence des unités ou des flux [1].

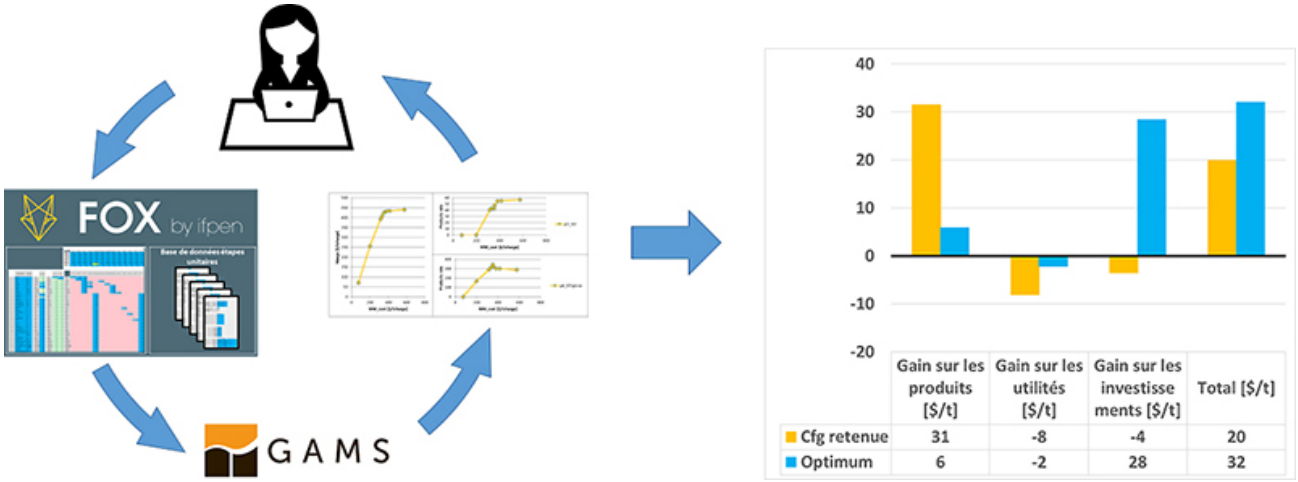
Malgré les travaux pour améliorer ces solveurs ainsi que la formulation des problèmes, traiter des cas industriels réels avec les solveurs MINLP actuels demeure complexe car la difficulté ne réside pas seulement dans les temps de calcul ; elle concerne aussi la capacité des solveurs à trouver des solutions.

La nécessité de prendre en compte de multiples variables – représentant des produits, des consommations énergétiques et des coûts – nous a conduit à adopter une approche linéaire qui permet d'utiliser des solveurs beaucoup plus performants et robustes. Dans ce cas, il convient de décrire chaque étape unitaire par un méta-modèle[a] [2]. Au-delà de l'obtention de méta-modèles linéaires représentatifs, nous avons développé une plateforme générique, FOX-Prod, permettant à la fois le déploiement de l'outil de calcul et l'entretien d'une base de données des méta-modèles

d’étapes unitaires. La base de données exploitée est le fruit de plusieurs années de capitalisation dans le domaine du raffinage et de la pétrochimie. La plateforme est interfacée avec le logiciel GAMS pour la modélisation algébrique et l’optimisation.

Dans un premier temps, cette plateforme a été testée sur un périmètre réduit et bien maîtrisé après des années de développement des procédés [3]. Par la suite, elle a fait ses preuves en générant des configurations innovantes d’unités sur un domaine mature où la marge d’optimisation était faible. A l’aide de méta-modèles obtenus par apprentissage sur des données issues d’un plan d’expérience, il a été possible de proposer le recyclage de certains flux et la mutualisation d’étapes de séparation.

La plateforme permet de plus l’optimisation sous contraintes. Ainsi, la Figure 2 représente les écarts d’un cas industriel de référence avec d’une part le scénario optimum absolu et d’autre part un scénario optimisé en tenant compte des contraintes sur la circulation des flux (« cfg retenue »). Le gain calculé, s’élève à plusieurs dizaines de dollars par tonne de charge traitée, ce qui représente une amélioration substantielle (plusieurs pourcents) et a par la suite été validé par des simulations de l’architecture ainsi identifiée.



	Gain sur les produits [$/t]	Gain sur les utilités [$/t]	Gain sur les investissements [$/t]	Total [$/t]
Cfg retenue	31	-8	-4	20
Optimum	6	-2	28	32

Figure 2 : Illustration de l’utilisation de la plateforme FOX-Prod – gauche : environnement utilisateur, droite : détail des gains sur la marge d’un complexe pétrochimique (écart en $/t comparé au scenario industriel de référence)

Les travaux menés depuis visent à étendre le champ d’application de la plateforme, en particulier pour le recyclage des plastiques et pour la production d’une molécule biosourcée, et la base de données des méta-modèles est enrichie pour cela. Des développements spécifiques (prise en compte des mélanges azéotropes[c], gestion des solvants, etc.) ont été nécessaires pour lever des limitations apparues à cette occasion. A court terme, il est prévu d’exploiter ces nouveaux développements pour optimiser les configurations et ainsi améliorer les performances d’unités industrielles pour la production de carburants renouvelables (production de carburant aviation par voie alcool-to-jet ou e-Fuel).

[a]- Modèle mathématique de type corrélatif dans lequel les données disponibles sont utilisées pour estimer les valeurs des paramètres.
b

- Celui de la production d'essence à partir de naphta.
[c]- Mélange liquide qui bout à température fixe en gardant une composition fixe.

Références :

1. L. Mencarelli, Q. Chen, A. Pagot, and I.E. Grossmann. ***A Review on Superstructure Optimization Approaches in Process System Engineering***. Computers & Chemical Engineering, 136, 2020.
   >> https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106808

2. L. Mencarelli, A. Pagot, and P. Duchêne. ***Surrogate-based Modeling Techniques with Application to Catalytic Reforming and Isomerization Processes***. Computers & Chemical Engineering, 135, 2020.
   >> https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106772

3. P. Duchêne, L. Mencarelli, and A. Pagot. ***Optimization Approaches to the Integrated System of Catalytic Reforming and Isomerization Processes in Petroleum Refinery***. Computers & Chemical Engineering, 141, 2020.
   >> https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.107009

Contact scientifique : alexandre.pagot@ifpen.fr

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Fox-Prod : bien combiner les unités pour des procédés optimisés

Motivé par la recherche de technologies innovantes dans le domaine du transport, IFPEN développe, depuis de nombreuses années, de nouveaux procédés de production de biocarburants (Vegan®, Futurol®, BioTfueL®) et participe à leur commercialisation. Parmi les différentes voies étudiées, la filière de production de bioéthanol à partir de ressources lignocellulosiques a de nombreux atouts à faire valoir, notamment en termes de disponibilité de la ressource et du fait des conditions opératoires de leur transformation, douces en comparaison d'un procédé thermochimique.

La fabrication du bioéthanol s'effectue en trois étapes-clés de transformation : le prétraitement de la biomasse lignocellulosique, l'hydrolyse enzymatique de la cellulose et la fermentation des sucres obtenus[a]. L'hydrolyse enzymatique a pour rôle principal de dépolymériser la cellulose en glucose et utilise pour cela un mélange d'enzymes spécialisées (endoglucanases, cellobiohydrolases, ?-glucosidases, etc.) qui agissent en synergie pour catalyser la réaction.

La durée caractéristique de cette hydrolyse est de plusieurs jours, ce qui est très long comparativement aux étapes de prétraitement et de fermentation, et réduire cette durée s'avère un axe significatif d'amélioration de la viabilité économique du procédé global. Des progrès notables ont été accomplis ces dernières années dans la compréhension des mécanismes réactionnels [1] mais sans permettre d'expliquer des phénomènes de désactivation qui affectent la réaction d'hydrolyse enzymatique en réduisant fortement l'activité enzymatique (d'environ 50 % par tranche de 24 heures). Parmi les phénomènes envisagés, la perte d'activité à l'interface air-liquide par dénaturation des enzymes, la perte d'activité par adsorption sur les surfaces ligneuses inertes et la perte d'activité par adsorption non productive sur les surfaces cellulosiques (enzymes bloquées sur la cellulose et n'agissant plus) ont été étudiées durant un travail doctoral[b].

L'étude expérimentale de la perte d'activité en présence du contact avec l'air a permis d'observer que le phénomène était très marqué pour de forts ratios (surface de contact sur volume de solution variant de 0.3 à 1.7 cm^2/cm^3) et pouvait entraîner des pertes d'activité allant jusqu'à 40 % (figure 1 - gauche). Elle a ensuite été complétée par une approche de modélisation cinétique pour prédire les pertes d'activité liées à ce phénomène particulier [2]. Le modèle nécessitant de connaître les surfaces air-liquide produites par l'agitation, celles-ci ont été déterminées par simulation numérique CFD[c] (figure 1 - droite).

Concernant les pertes d'activité liées à l'adsorption des enzymes sur différentes surfaces de la biomasse lignocellulosique, d'autres travaux menés au cours de la thèse ont permis d'évaluer la répartition des enzymes adsorbées sur les surfaces cellulosiques et ligneuses au cours de l'hydrolyse enzymatique. Les enzymes adsorbées sur la lignine ne participant pas à la réaction, ces travaux ont permis de montrer, à partir de calculs d'isothermes d'adsorption, que les pertes d'activité enzymatique liées à l'adsorption sur la lignine pouvaient représenter jusqu'à 25 % de l'activité initiale (publication en cours).

L'ensemble de ces résultats sera couplé avec les modèles mécanistiques déjà disponibles à IFPEN [1] pour améliorer la prédiction des performances en hydrolyse enzymatique, pour optimiser les temps de réaction et pour réduire les volumes de réacteurs fermentaires.

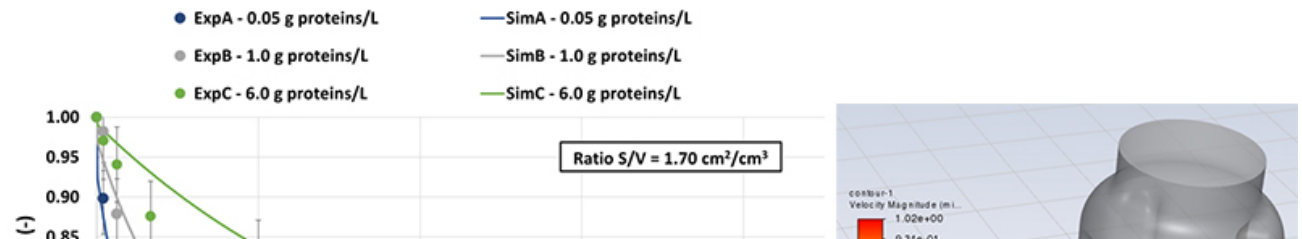


Figure 1 : Impact des surfaces air-liquide sur la désactivation enzymatique : Etude expérimentale réalisée sur une table à agitation orbitale (gauche) – Etude numérique effectuée par CFD-Numerics (droite)

[a]- Glucose, xylose, galactose, arabinose, mannose.
[b]- Thèse de Laura Cachafeiro, « Hydrolyse enzymatique de la biomasse lignocellulosique : étude de l'adsorption et de la désactivation des cellulases », Université Lyon 1, 2023 (sous la direction de D. Hudebine - IFPEN).
[c]- *Computational Fluid Dynamics.*

Références :

1. M. Huron, D. Hudebine, N. Lopes Ferreira, D. Lachenal, ***Mechanistic modeling of enzymatic hydrolysis of cellulose integrating substrate morphology and cocktail composition***, Biotechnology and Bioengineering, 113(5), pp. 1011-1023, 2016.
   >> DOI: 10.1002/bit.25873

2. [2] L. Cachafeiro, S. Heiss-Blanquet, D. Hudebine, ***An experimental and modeling approach to describe the deactivation of cellulases at the air–liquid interface***, Biotechnology and Bioengineering, Early Access, 2024.
   >> DOI: 10.1002/bit.28698

Contact scientifique : Damien Hudebine

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Mieux comprendre la désactivation enzymatique durant l’hydrolyse de la biomasse lignocellulosique

IFPEN est un leader mondial dans le développement de l'hydrotraitement[a] de charges fossiles pour la production de carburants propres. Des procédés de la même famille s'appliquent désormais à une plus grande diversité charges : pyrolysats de plastique ou de pneus, dans le contexte du recyclage chimique, huiles végétales pour produire des biocarburants, etc. Pour que ces procédés soient eux-mêmes éco-efficients[b], au-delà du bénéfice environnemental recherché, leurs conditions opératoires doivent être optimisées par l'utilisation de modèles cinétiques ou hybrides[c], en fonction des charges utilisées et des spécifications recherchées pour les produits visés.

Dans un contexte compétitif, le développement de nouveaux procédés doit être rapide et il est nécessaire de réduire au minimum la phase expérimentale, toujours chronophage et coûteuse, sans dégrader la qualité des modèles qu'elle alimente. C'est là qu'intervient l'apprentissage par transfert[d], approche consistant à pré-entraîner un modèle sur un domaine similaire puis à l'adapter à une problématique spécifique, de manière à tirer parti de connaissances déjà acquises.

A l'issue d'une thèse en collaboration avec la direction « Expérimentation Procédés » [1], des méthodologies de type bayésien[e] et Monte Carlo Markov Chain[f] ont été mises en œuvre pour transférer les informations issues du « monde fossile », comme la mise au point d'anciens catalyseurs, vers les nouveaux catalyseurs ou les nouveaux procédés [2, 3].

Cette démarche a produit deux gains principaux :

1. Pour le cas d'un nouveau catalyseur, un modèle a été entraîné sur les anciennes données d'installations-pilotes et industrielles. Le modèle a ensuite été transféré sur le nouveau catalyseur et s'avère de bien meilleure qualité que celui obtenu par des techniques traditionnelles (RMSE[g] = 4.8°C pour l'ancienne méthode, 2.9°C pour la nouvelle).

2. Dans le cas de nouvelles charges, et notamment du procédé Rewind Mix[h] de purification des huiles de pyrolyse de déchets plastiques, un nouveau modèle a pu être mis en place très rapidement avec un nombre réduit de points expérimentaux (cf. Figure 1). L'approche « transfer learning » permet également un gain sur la robustesse du modèle.

Ces travaux sont également utilisés dans les domaines plus traditionnels de l'hydrotraitement et pas moins de cinq projets de recherche en ont bénéficié à ce jour pour accélérer la mise à disposition de nouveaux modèles et la réduction de leurs coûts d'accès.

Dans le contexte de la transition écologique où s'impose la nécessité de traiter de nouvelles charges, biosourcées ou recyclées, ce travail est une contribution importante au développement de nouveaux procédés. En tirant parti au maximum des connaissances antérieures, il contribue à en accélérer la mise au point, ce qui constitue un important avantage compétitif sur ces marchés en devenir.

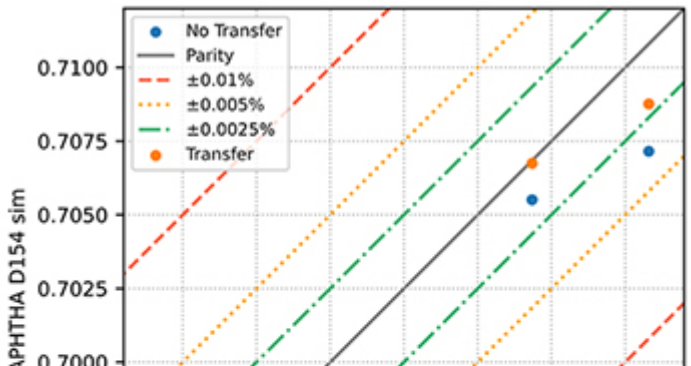


Figure 1: Prédiction de la densité de la coupe Naphta (i) sur une base de validation (bleu : approche traditionnelle, orange : approche Transfer Learning

[a]- Ce procédé consiste à supprimer les hétéro-éléments (N, S…) et à craquer les molécules pour produire des carburants. Pour atteindre les spécifications requises, l'utilisation de l'hydrogène est indispensable.
[b]- L'éco-efficience exprime le lien entre le bénéfice économique et l'impact environnemental causé.
[c]-Mixant approches chimiques traditionnelles et dernières avancées en data science.
[d]- Ou « transfer learning ».
[e]- Approches statistiques fondées sur l'inférence bayésienne, où la probabilité exprime un degré de croyance en un événement.
[f]- https://www.lemonde.fr/blog/binaire/files/2016/06/MCMC.pdf
g- Erreur quadratique moyenne (Root mean square error.
h- https://www.axens.net/markets/plastic-recycling
i- Hydrocarbures légers que l'on récupère vers le haut de la colonne de distillation.

Références :

1. L. Iapteff, **Apprentissage par transfert pour l'analyse prédictive intelligente**, Thèse IFPEN, Université Lyon II, 2022
   >> https://theses.fr/2022LYO20007

2. P.J. Becker, L. Iapteff, B. Celse, ***Improving Model Robustness with Transfer Learning for Product Property Models***, Proceedings of the 33rd European Symposium on Computer Aided Process Engineering / 14th International Symposium on Process Systems Engineering (ESCAPE33/PSE23), 2023.
   >> https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15274-0.50168-2

3. W. Pejpichestakul, P.J. Becker, B. Celse, ***Transfer Learning of Hydroprocessing Model from Fossil Feedstocks to Waste Plastic Pyrolysis Oil***, Proceedings of the 34th European Symposium on Computer Aided Process Engineering / 15th International Symposium on Process Systems Engineering (ESCAPE34/PSE24), 2024.
   >> https://view.officeapps.live.com

Contact scientifique : benoit.celse@ifpen.fr

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Valoriser les enseignements du «monde fossile» au bénéfice des procédés plus verts

Témoignage de Li Zhang, ingénieur process à IFPEN

D'après le scénario NZE (Net Zero Emission) de l'IEA[a], le déploiement du CCUS (Carbon Capture Utilisation and Storage) doit s'accélérer pour passer d'environ 40 Mt de CO_2 captées au niveau mondial en 2022 à 1 Gt en 2030 [1]. Parmi les solutions développées, le captage en postcombustion au moyen de solvants est, à ce jour, considéré comme l'une des plus robustes, efficaces et pertinentes [2].

C'est ainsi qu'est née la solution DMX^{TM}, qui répond au besoin de disposer de technologies efficaces et économiques. Fruit de plus de 10 ans de recherche à IFPEN, cette technologie arrivant en phase finale de développement, avait besoin d'être démontrée dans un cadre industriel réel [3] [4].

Aussi, en 2019, le projet 3D[b] (DMX Demonstration in Dunkirk) a vu le jour, avec comme objectif de construire un démonstrateur industriel. Pour ce faire, quoi de mieux que de le construire dans un des plus grands sites industriels d'Europe, participant ainsi à la feuille de route de décarbonation d'un des principaux émetteurs français, le site sidérurgique d'ArcelorMittal à Dunkerque (photo 1) ?



Photo 1 : Démonstrateur industriel DMX(TM) sur le site sidérurgique d'ArcelorMittal à Dunkerque.

Ce projet a nécessité la contribution d'une équipe spécifique d'IFPEN implantée sur le site industriel, pour suivre la construction et réaliser les tests, avec le soutien à distance de l'équipe IFPEN basée sur le site de Solaize. Pour la première fois, IFPEN avait la responsabilité d'une opération sur un site industriel extérieur !

Les modules de plus de 26 mètres de hauteur sont arrivés sur site en novembre 2021, après des mois d'études et de construction en atelier.

Après raccordement du démonstrateur aux conduites des gaz de haut fourneau du site sidérurgique, les opérations de mise en route des équipements ont démarré en mars 2022 sous la coordination technique du partenaire AXENS (photo 2).



Photo 2 : Une partie de l'équipe IFPEN/AXENS sur site.

En tant qu'ingénieur process au sein de l'équipe IFPEN, j'ai suivi les essais depuis la mise en route jusqu'à la fin de la campagne de tests sur le site de Dunkerque. Avant de m'y rendre, j'avais travaillé en tant qu'ingénieur « Process Design », en utilisant une première version du simulateur numérique du procédé DMX^{TM}. Cette fois, je me trouvais « de l'autre côté », pour participer à l'acquisition des données expérimentales qui ont permis d'améliorer le modèle de simulation, lequel servira à dimensionner les futurs équipements !

Je me suis aussi confronté à la réalité du terrain et à tous les imprévus qui peuvent survenir pendant une démonstration et qui rendent chaque point expérimental unique et précieux. La démonstration industrielle et la conception des procédés sont ainsi les deux faces d'une même pièce !

A ce jour, un peu plus de 2 ans après la fin de la construction sur site, la démonstration du procédé DMX^{TM} est terminée. Après évaluation sur des compositions de gaz représentatives de différentes applications[c] (aciérie, cimenterie ou centrale électrique), les performances du procédé de captage ont été validées, révélant divers bénéfices :

- une réduction particulièrement intéressante de la pénalité énergétique (30 % de moins par rapport à des solvants de type MEA ou CESAR1[d]),
- une capacité de captage importante du solvant, une haute qualité du CO_2 capté[e],
- une bonne stabilité du solvant, etc.

Au-delà du succès de la démonstration, les données obtenues lors de la campagne de tests ont permis de produire une nouvelle version du simulateur dont va bénéficier le partenaire AXENS[f].

Même si la démonstration du procédé DMX^{TM} est aujourd'hui terminée, l'équipement de Dunkerque va encore être utilisé quelques mois pour tester une nouvelle formulation de solvant. Cette fois-ci, je suivrai les tests depuis mon poste à IFPEN mais ce sera l'opportunité pour d'autres collègues d'aller vivre cette expérience unique : celle de voir aboutir concrètement des années de recherche au service de la décarbonation de l'industrie et ainsi contribuer à la lutte contre le dérèglement climatique.

[a]- International Energy Agency (Agence Internationale de l'énergie AIE).
[b]- Les partenaires du projet : ArcelorMittal France, TotalEnergies et AXENS. Capacité du démonstrateur : 0.5t CO_2 capté par heure.
[c]- Le gaz haut fourneau a servi comme base du gaz de charge pour l'unité, mais d'autres compositions ont été produites volontairement avec les recyclages de l'unité, afin de valider le procédé DMX^{TM} pour de différentes applications.
[d]- MEA : solution aqueuse avec monoethanolamine, CESAR1 : solution aqueuse avec 2-amino-2-methylpropanol (AMP) and pipérazine (PZ).
[e]- Pureté du CO_2 supérieure à 99 % (CO_2 sec).
[f]- Développement du logiciel piloté par P. Bachaud et V. Carlier.

Références :

1. IEA Ed.
   >> https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2023

2. L. Raynal, P.A. Bouillon, A. Gomez, P. Broutin, ***From MEA to demixing solvents and future steps, a roadmap for lowering the cost of post-combustion carbon capture***, Chemical

Engineering Journal 171 (2011) 742-752.
>> DOI: 10.1016/j.cej.2011.01.008

3. P. Broutin, P. Briot, S. Ehlers, A. Kather, ***Benchmarking of the DMXTM CO_2 Capture Process***, Energy Procedia 114 (2017) 2561-2572.
   >> DOI: 10.1016/j.egypro.2017.03.1414

4. M. Dreillard, P. Broutin, P. Briot, T. Huard, A. Lettat, ***Application of the DMXTM CO_2 Capture Process in Steel Industry***, Energy Procedia 114 (2017) 2573 -2589.
   >> DOI: 10.1016/j.egypro.2017.03.1415

Contact scientifique : catherine.laroche@ifpen.fr **Cheffe de projet : Vania Moreau**

>> NUMÉRO 55 DE SCIENCE@IFPEN

Conception de procédé et Démonstration industrielle, les 2 faces d’une même pièce

Numéro 55 de Science@ifpen - Conception Modélisation Procédés
10 juin 2024

Lien vers la page web :