



Société Française
de Génie des Procédés

Des réponses aux défis
industriels du XXI^{ème} siècle

28, rue Saint Dominique
75007 PARIS
tél. : 01 53 59 02 12
fax. : 01 45 55 40 33
email : secretariat@sfgp.asso.fr

Groupes

INFORMATIQUE ET PROCÉDES

(I.E.P.)

&

THERMODYNAMIQUE
(Thermo)

Projet de compte-rendu du Forum du 12 mai 2011

Liste des participants :

La liste des 44 participants est fournie en annexe.

Ce projet de compte-rendu a été rédigé par Jean-Charles de HEMPTINNE et Marie DEBACQ-LAPASSAT.

Résumé :

Le Forum annuel du groupe IEP était organisé conjointement avec le groupe Thermodynamique de la SFGP. Il s'est tenu à l'Ensiacet à Toulouse. La thématique de la journée portait sur les modèles thermodynamiques, leur utilisation dans l'industrie et leur développement par des chercheurs. La mise en commun des expériences de ces deux mondes montre que la mise à disposition de nouveaux modèles passe presque exclusivement par les fournisseurs de logiciels. Les besoins exprimés par l'industrie ne portent pas tant sur un 'modèle universel' mais plutôt vers des modèles adaptés aux besoins nouveaux (on a surtout parlé de solutions d'électrolytes) et/ou qui décrivent plus correctement les propriétés dérivées (capacités calorifiques par exemple).

1 - Présentations :

Béatrice BISCANS, directrice du LGC, inaugure la journée et présente les activités de son laboratoire.

Michel SARDIN, président du Comité Scientifique et Technique (CST), présente la SFGP et ses activités.

Jean-Charles de HEMPTINNE et Xuân MEYER, respectivement présidents du groupe Thermo et du groupe IEP présentent ces groupes, ainsi que le programme de la journée.

2 - "Besoins industriels : enjeux des simulations, modèles utilisés et espérés" :

Pierre DUCHET-SUCHAUX (Total) et Philippe ARPENTINIER (Air Liquide) présentent l'utilisation des modèles thermodynamique dans leur société.

Pour Total, l'exposé se concentre sur l'exploration-production. De nombreux besoins en nouveaux modèles existent, aussi bien pour gérer de nouveaux constituants (alcools, gaz acides, électrolytes, mercure, mercaptans) que des propriétés inhabituelles (capacité calorifique proche de la température critique, viscosité en émulsion) ou de types d'équilibres inhabituels (multiphasiques). Total fait appel à de nombreux fournisseurs de logiciel, chacun pour une application distincte.

Pour Air Liquide, on distingue deux types de modèles : un modèle principal pour le procédé global, représentant au mieux l'opération unitaire clé (e.g. modèles de type γ - ϕ ou ϕ - ϕ), qui doit obligatoirement être disponible dans un simulateur ; et un modèle secondaire pour dimensionner un équipement particulier (plutôt des modèles corrélatifs), qui peut se résumer à une application externe (feuille Excel, exécutable, ...).

3 - "Développement d'un modèle thermodynamique" :

Claude-Gilles DUSSAP (Polytech'Clermont-Ferrand, Université Blaise Pascal) présente les différents éléments importants pour la construction d'un modèle thermodynamique. L'exemple support est assez complexe, puisqu'il s'agit de traiter des biosystèmes avec des composés très polaires et des électrolytes. Il insiste aussi sur les difficultés de communication entre différentes communautés.

4 - "Interopérabilité, quelles solutions ?" :

Michel PONS présente le concept de Cape-Open, les actions réalisées, en cours et à venir. On note en particulier la mise à disposition d'un code *open source* et le développement de codes de *Property Packages* en C++, VB avec installateur par AmsterCHEM (livraison d'ici trois mois). Ces codes sources seront mis à disposition de la communauté Cape-Open *via* le site du CoLaN.

Olivier BAUDOUIN (Prosim) présente l'outil ProSimPlus et le composant Simulis Thermodynamics. Il insiste en particulier sur la possibilité de faire travailler en collaboration les

chercheurs pour intégrer de nouveaux modèles dans Simulis Thermodynamics (e.g. modèle ULPDHS, modèle NRTL-PR (E. Neau), modèle PR78 (J.N. Jaubert, Ensic) et modèle PPC-SAFT (IFPEN et LIMHP)). Des applications dans le cadre de travaux faits pour des industriels sont aussi mentionnées (e.g. couplage avec le logiciel RefProp développé par le NIST ; modèle de Bender spécifique au ternaire de l'air pour Air Liquide ; modèle pour le procédé HySWEET de Total comportant de l'eau, des amines et du thiodiglycol pour le lavage du gaz naturel).

5 - Forum posters :

Trois posters ont été présentés :

- "gSAFT: Harnessing the power of next generation thermodynamic modelling for complex fluids in a tool designed for industrial application" PSE, Imperial College London (C.S. ADJIMAN, F. CALADO, A. GALINDO, G. JACKSON, T. LAFITTE, J.C. MANI, C.C. PANTELIDES, V. PAPAIOANNOU, T.H. WILLIAMS)
- "Le projet Memobiol" IFPEN, Mines ParisTech, Ensta, LIMHP, Materials Design Sarl, Prosim (R. LUGO, N. FERRANDO, J.C. de HEMPTINNE, C. COQUELET, P. PARICAUD, P. TOBALY, J.P. PASSARELLE, E. AUGER, F. VOLLE, Ph. UNGERER, M. YIANNOURAKOU, O. BAUDOIN)
- "Relationship between the binary interaction parameters of the Peng-Robinson and those of the Soave-Redlich-Kwong equations of state. Application to the definition of the PR2SRK model" Ensic-LRGP (J.N. JAUBERT, R. PRIVAT)
- "Représentation des propriétés d'équilibre dans les produits carnés par un modèle thermodynamique de solution aqueuse : détermination et prédiction des activités pour des espèces chargées, en particulier Na^+ " Université Blaise Pascal - Clermont Ferrand (O. TOURE)
- "Étude des propriétés thermodynamiques des systèmes $\text{H}_2\text{S}+\text{HC}$. Application du logiciel Simulis Thermodynamics " Mines ParisTech, IFPEN (P. THÉVENEAU, M. DICKO, C. COQUELET, P. MOUGIN)

Après une présentation rapide de chaque poster avant le déjeuner, les participants se retrouvent devant ces posters pour discussion après le déjeuner.

6 - Table ronde "Développement et diffusion de modèles thermodynamiques" :

Pour clore la journée, une table ronde est animée par Jean-Charles de HEMPTINNE avec des intervenants industriels (Jean-Jacques BARTUEL – Technip, Mathias BREHELIN – Rhodia), des intervenants académique (Jean-Noël JAUBERT – Ensic-LRGP, Xavier JOULIA – Ensiacet-LGP) et des représentants de fournisseurs de logiciel (Olivier BAUDOIN – ProSim, Juan Carlos MANI – PSE).

Jean-Charles de HEMPTINNE ouvre le débat avec quelques questions. Où est la force motrice : est-ce l'idée du chercheur ou le besoin industriel ? Quel type de modèle : un modèle "qui fait tout" (la "lettre au Père Noël" évoquée par certains orateurs de la matinée) existera-t-il ? à quelle échéance ? ou faut-il se satisfaire de modèles spécifiques ? Quel format pour le modèle pour son usage industriel : format propriétaire ? format Cape-Open ?

Un premier tour des intervenants permet à chacun de se positionner :

Jean-Jacques BARTUEL précise que chez Technip, il y a d'abord eu des outils spécifiques car il n'existait rien de stable sur le marché, puis ils sont passés aux outils commerciaux. Chez Technip, il n'y a pas de difficulté particulière sur la connaissance de la charge, qui est bien décrite, et même contractuelle. Les modèles utilisés doivent avoir un retour d'expérience solide, ils n'utilisent pas de modèle prédictif.

Olivier BAUDOIN rappelle que ProSim se trouve à l'interface entre développeurs de modèles et utilisateurs. "Autrefois" ProSim travaillait en interne à partir des publications, aujourd'hui ProSim

cultive un lien plus direct avec les équipes de recherche afin de faire le pont entre ces équipes de recherche et les industriels.

Jean-Noël JAUBERT rappelle qu'il développe avec son équipe un modèle thermodynamique type équation d'état, et comme le caractère prédictif est essentiel, son équipe y travaille aussi. Sa préoccupation est de répondre aux préoccupations industrielles (partenariat pérenne avec Total) mais en conservant sa liberté d'universitaire car l'aspect fondamental l'intéresse. La mise à disposition des modèles pour les industriels n'étant pas son métier, ProSim et ProII l'ont fait.

Mathias BREHELIN précise qu'il intervient en appui en distillation et thermodynamique pour la R&D et l'ingénierie chez Rhodia, qui n'utilise pas de simulateur maison mais des simulateurs du commerce (CosmoTherm, Aspen, Consortium Unifac). Il n'y a pas de problème d'interopérabilité car l'utilisation de logiciels spécifiques (CFD par exemple) est marginale. Rhodia n'est pas à la recherche de nouveaux modèles thermodynamiques car les modèles existants conviennent (modèle à coefficients d'activité essentiellement), bien que Rhodia produise de nombreux produits différents et de nombreux produits nouveaux chaque année. Seules quelques applications nouvelles nécessitent une réflexion pour améliorer les modèles. Le cas des électrolytes a été mentionné comme ayant encore besoin de développements. Pour Mathias BREHELIN l'enjeu est avant tout de mettre le bon effort à la bonne phase du projet : en phases 0 et 1, il faut une réponse rapide à l'idée du chimiste sur un comportement global en distillation par exemple ; en phase 2, l'étude thermodynamique est plus conséquente et permet la détermination de paramètres pour un dimensionnement précis. Sa "lettre au Père Noël" n'est pas le modèle "qui fait tout", il attend plutôt que les nouveaux modèles soient implantés dans son simulateur préféré pour regarder de près ce qu'ils sont capables de faire.

Juan Carlos MANI explique qu'une grande partie du travail de PSE est en réalité du conseil vis-à-vis d'utilisateurs qui ne savent pas bien comment utiliser les outils thermodynamiques. PSE est un opérateur de niche pour des systèmes très particuliers, il y a donc nécessité d'une relation étroite avec le monde académique (Imperial College en l'occurrence). Juan Carlos MANI précise qu'il vient du monde académique, puis a longtemps travaillé dans l'industrie. Selon lui l'utilisateur a aujourd'hui beaucoup moins de responsabilité dans le résultat qu'autrefois ; aujourd'hui, même sans connaître le produit et le procédé, on obtient un résultat ! et on a tendance à lui faire confiance... Pour lui aussi, l'association idéale est académique-éditeur de logiciel-industriel.

Xavier JOULIA estime que le rôle du monde académique est de capitaliser et structurer la connaissance, la meilleure façon de le faire étant la mise en équation, donc la fabrication de modèles. Un paramètre estimé est aussi un capital de connaissance, car il y a une expérience derrière. La complexité de cette tâche est liée à la diversité de la matière : on peut soit chercher le modèle universel (utopie ?) soit essayer de gérer cette diversité. Il observe que les industriels semblent s'orienter vers une forme de classification soit par secteur : la pétrochimie (où règnent les molécules apolaire, éventuellement sous haute pression, représentées par des équations d'état) et les autres (pour lesquels le constituant majeur est l'eau, avec des molécules plutôt polaires et à pression modérée) ; ou bien une classification hiérarchique : le modèle global simple puis des modèles plus adaptés pour les points à regarder de plus près. Pour Xavier JOULIA, les universitaires essayent de gérer la diversité par le prédictif (contributions de groupes). Enfin les vendeurs de logiciels ayant des problèmes d'interopérabilité, ont été conduits à définir des interfaces standard. Il conclut en disant ne pas croire au modèle universel, et encourage plutôt à gérer la diversité.

discussion sur le développement de modèles

Olivier BAUDOIN (ProSim) constate que le monde industriel est demandeur de modèles capables de répondre à une plus grande diversité et ayant des champs d'application plus vastes. Il rappelle qu'il n'y a pas si longtemps, on n'imaginait pas qu'une équation d'état puisse gérer un composé polaire ; selon lui les progrès continueront. Il indique également que ProSim est amené à intervenir pour implanter dans les simulateurs des "nouveaux" modèles parfois présents de longue date "dans les cartons" des industriels ; il ne s'agit d'ailleurs pas forcément véritablement de nouveaux

modèles, mais plutôt d'informations permettant de renseigner des paramètres de modèles "classiques".

Jean-Jacques BARTUEL rappelle que Technip doit avant tout livrer une unité qui fonctionne. Il préfère donc continuer avec des modèles maîtrisés, callés avec des données jugées sérieuses. Michel PONS confirme cette attitude prudente des industriels : comment faire pour leur faire accepter un nouveau modèle ? Jean-Jacques BARTUEL précise que très souvent, leur client impose son choix de modèle ; il serait suicidaire de répondre à un appel d'offre en en proposant un autre.

Jean-Charles de HEMPTINNE se demande si les industriels vont vers les nouveaux modèles ou sollicitent les académiques pour qu'ils créent un nouveau modèle quand ils sont confrontés à un problème.

Mathias BREHELIN constate que, d'une certaine façon, les industriels utilisent de "nouveaux" modèles puisqu'ils utilisent les dernières versions de modèles nés il y a longtemps. Il considère que les modèles doivent rester vivants pour garder leur intérêt. Il constate que les industriels ont de temps en temps des problèmes de modélisation qui peuvent être liés à un problème de modèle thermodynamique.

Xavier JOULIA fait également le constat que, tant que l'on ne fait pas évoluer le procédé ou le produit, il n'y a pas nécessité de nouveaux modèles, mais que dès que l'on essaie de nouvelles choses (hydrates chez Total, CO₂ supercritique, ...) il faut sortir de la "routine" de l'industrie. Il souligne également l'importance de la notion d'ouverture des logiciels.

Juan Carlos MANI explique que PSE a eu l'occasion de développer des modèles pour des problèmes d'équilibres de phases pointus (liquide-liquide) car les modèles classiques n'avaient pas été développés pour ces cas. Il pointe aussi du doigt la nécessité de modèles plus pointus pour faire des bilans d'énergie (les équations d'état n'étant pas très fiables pour restituer le comportement thermique des systèmes : capacités calorifiques, enthalpies), prédire des adsorptions/désorptions de CO₂, etc. : il ne s'agit plus de prédire uniquement les équilibres de phases, mais aussi de nombreuses autres propriétés. Mathias BREHELIN confirme l'intérêt de ne pas seulement effectuer les bilans matière, mais aussi les bilans d'énergie.

Jean-Noël JAUBERT souligne que les comparaisons de modèles sont souvent pauvres dans les publications : peu de données expérimentales sont disponibles pour effectuer ces comparaisons, en outre il s'agit souvent uniquement des équilibres de phases, et rarement des propriétés dérivées.

Xavier JOULIA indique comme pratique courante l'utilisation de deux équations différentes pour les équilibres de phases et les autres propriétés. Il souligne qu'il est encore plus rare de disposer des propriétés de transport.

Jean-Charles de HEMPTINNE se demande quelle aide pourrait apporter la SFGP *via* ses groupes de travail : proposer des données pour caler les modèles, les comparer ? Michel PONS rappelle que Dechema propose cela, mais pour un coût exorbitant.

Pierre BRIEND, expert thermodynamique chez Air Liquide signale que dans certains cas, on peut tomber sur des situations complexes inattendues. Il cite deux exemples : problème de miscibilité silanes/N₂ à basse température ; problème de prédiction des solubilités mutuelles He + H₂ dans le combustible pour Ariane. Dans les deux cas, le besoin industriel met en évidence la nécessité d'un travail de modélisation mais aussi d'expérimentation.

Xuân MEYER considère qu'il est rassurant pour le monde académique qu'il y ait encore des problèmes non résolus. Elle espère que l'augmentation des moyens informatiques et des outils d'optimisation permettra d'utiliser couramment des modèles plus complexes.

Juan Carlos MANI considère que seul un travail collaboratif académiques/industriels peut répondre aux problèmes actuels. Jean-Charles de HEMPTINNE conclue cette partie sur l'importance de définir les enjeux futurs pour que les académiques puissent y travailler dès à présent.

discussion sur l'interopérabilité

Michel PONS rappelle que Simulis (ProSim) étant compatible Cape-Open, les modèles qui y sont implantés deviennent utilisables partout !

Pierre DUCHET-SUCHAUX mentionne quelques expériences malheureuses de Total avec le Cape-Open : cas de l'utilisation de CPA *via* Multiflash (au final, cette utilisation n'a pas donné satisfaction à Total, et Infochem a dû fournir des interfaces Fortran de Multiflash pour utiliser CPA). Total ne ressent pas le besoin d'utiliser Cape-Open pour faire appel à des modèles et à des opérations unitaires proposées par différents développeurs, ce qui est lourd à gérer. Pierre DUCHET-SUCHAUX reconnaît aussi que Total a le poids nécessaire pour exiger de l'éditeur, qu'il lui fournisse le modèle souhaité dans son simulateur.

Pierre BRIEND (Air Liquide) donne l'exemple d'Hysys, où le paramétrage de BWR n'est valable que jusqu'à 10 K. Pour contourner cette limitation, ils ont couplé Hysys avec une version Cape-Open de BWR, mais le temps de calcul est beaucoup plus important et il y a des difficultés liées aux références de température différentes selon les modèles.

Jean-François CHAPAT indique qu'Axens utilise surtout ProII et un peu ProSim. Ils ont voulu avoir un outil Cape-Open capable de dialoguer avec les deux : succès avec ProSim ; problèmes avec ProII. Mais surtout sur des projets courts, cette démarche n'est pas possible.

Jean-Charles de HEMPTINNE rappelle un des intérêts majeurs de Cape-Open : disposer de la même description du produit partout dans le procédé, même si on utilise des simulateurs différents pour telle ou telle partie de l'unité.

Juan Carlos MANI souligne que les simulateurs généraux (outils de *flow-sheeting*) ne permettent pas de représenter la complexité par exemple des injections dans un réacteur : comment intégrer un module "pointu" de réacteur dans un simulateur général ?

discussion sur le calage des modèles

Jean-Charles de HEMPTINNE se demande s'il serait intéressant de disposer d'une base de données pour tester les modèles. Il s'interroge sur les possibilités offertes par des modèles plus physiques (modélisation moléculaire) pour les mélanges "inconnus". Jean-Noël JAUBERT rappelle que si personne n'a jamais fait d'expérience sur un mélange donné, aucun modèle ne peut être calé. Jean-François CHAPAT se demande comment corréler les résultats du modèle à ceux des pilotes.

Xuân MEYER constate que la dérive consistant à utiliser les simulateurs comme des "boutons" et à toujours faire confiance aux résultats existe aussi du côté des modèles d'opérations unitaires. Xavier JOULIA souligne l'importance de connaître l'incertitude : il n'est pas forcément nécessaire de disposer d'un modèle précis, il faut connaître cette incertitude et prendre la marge correspondante. Il souligne également le fait qu'il est indispensable, à un moment donné, de confronter le modèle à l'expérience. Pierre BRIEND confirme que les industriels sérieux doivent expliquer comment les modèles sont validés, et donc forcément faire (ou faire faire) des expériences.

conclusions

Jean-Charles de HEMPTINNE résume et conclut cette table ronde :

1. Concernant le développement de modèles, la grande industrie rêve du modèle "qui fait tout", mais est relativement peu motivée à promouvoir des travaux novateurs. Afin de prévoir les "coups durs" ; il reste cependant nécessaire de poursuivre les recherches sur les systèmes complexes, et on a mentionné en particulier les électrolytes mais également les systèmes biologiques qui méritent des modèles plus prédictifs.

2. Concernant la mise à disposition des outils de calcul, le passage par les fournisseurs de logiciel est clairement la voie préférée.

Forum IEP-thermo (12 mai 2011)*liste des participants*

Philippe ARPENTINIER	Air Liquide
Jean-Jacques BARTUEL	Technip France
Olivier BAUDOIN	PROSIM
Mathias BREHELIN	Rhodia
Pierre BRIEND	Air Liquide
Séverine CAMY	LGC - INPT-ENSIACET
Jean-François CHAPAT	AXENS
Christophe COQUELET	Mines ParisTech
Francis COURTOIS	Agroparistech
Jean-Charles de HEMPTINNE	IFP Energies nouvelles
Jacob de SWAAN ARONS	Delft University of Technology
Marie DEBACQ-LAPASSAT	CNAM - CASER - GPCP
Stéphane DECHELOTTE	PROSIM
Moussa DICKO	Mines ParisTech
Pierre DUCHET-SUCHAUX	Total Petrochemicals Research Feloy
Claude-Gilles DUSSAP	LGCB
Pascal FLOQUET	LGC - INPT-ENSIACET
Sylvain GALIER	Laboratoire de Génie Chimique
Amparo GALINDO	Imperial College
Vincent GERBAUD	LGC
Christelle GOUTAUDIER	Université Lyon 1
Juliette HEINTZ	LGC
Gilles HETREUX	LGC - INPT-ENSIACET
Raphaële HETREUX	LGC - INPT-ENSIACET
Jean-Noël JAUBERT	ENSIC - LRGP
Xavier JOULIA	LGC - INPT-ENSIACET
Nayiri KATCHERESSIAN	LGC/ CEA / ALSTHOM
Patrice KIENER	InModelia
Rafael LUGO	IFP Energies nouvelles
Juan-Carlos MANI	Process Systems Enterprise
Xuan MEYER	LGC - INPT-ENSIACET
Pierre ODRU	Agence Nationale de la Recherche
Michel PONS	Co-Lan
Martine POUX	LGC
Romain PRIVAT	ENSIC - LRGP
Fabien RIVOLLET	Processium
Michel SARDIN	ENSIC - LRGP
Weifeng SHEN	LGC
Moises TELES DOS SANTOS	LGC
Iréa TOUCHE	LGC
Oumar TOURE	LGCB
Jean-Michel TURMO	Rhodia
Pierre VAN GRAMBEZEN	Total Petrochemicals Research Feloy
Golo ZICK	Air Liquide