

Journée thématique

La Thermodynamique et les Bioprocédés

Organisé le 12 décembre 2012 à IFP Energies nouvelles par les groupes de travail « Thermodynamique et Procédés », « Procédés Biologiques et Alimentaires » et « Procédés Séparatifs » de la SFGP.

Participation: 60 participants dont une partie importante de l'industrie (SANOFI, INGREDIA, VEOLIA, INERIS, PSA Peugeot Citroen, TOTAL, RSI, L'Oreal, ARD, IFPEN, Lhoist SA, Processium, Ingredia, ProSim SA, ..). Cette nombreuse participation industrielle confirme l'intérêt que portent ces organismes au sujet abordé.

Présentations: Les thématiques étaient volontairement relativement larges afin de permettre à tous de mieux apprécier le contexte et les technologies existantes ailleurs.

J-L Simon (Ingredia) a insisté sur les analogies entre les procédés dont sont le siège le monde inerte et les organismes vivants: les mêmes lois s'y appliquent. Les difficultés sont liées à l'importance du contrôle de la température, et donc des phénomènes d'échanges (thermiques et énergétiques), ainsi qu'à la complexité multi-échelle. Le vivant se caractérise par la programmation génétique de la mise à disposition des catalyseurs dans le temps (de la naissance à la mort) et dans l'espace (corps, organes, compartimentation cellulaire).

C-G Dussap (U Clermont-Ferrand) a insisté sur l'importance de prendre en compte correctement les effets de non-idéalités, souvent négligés. Il a montré que l'outil COSMO-RS permet de bien prendre en compte les effets courte-portées dans les interactions intermoléculaires.

J Morchain (INSA Toulouse) a bien mis en lumière les phénomènes multi-échelle dans un réacteur, en se concentrant sur le phénomène de transfert de matière (apport d'oxygène et de nutriments) à l'aide de simulation numérique directe du transfert de nutriment à l'échelle cellulaire (thèse IMFT-LISBP).

N. Charon (IFPEN) a décrit la complexité moléculaire présente dans des fluides issus du traitement de la biomasse (pyrolyse rapide et conversion hydrothermale). Si l'application visait la fabrication de carburants, les commentaires ont mis en évidence la richesse de ces produits en vue de la production de synthons d'origine biologiques.

P. Rotureau (INERIS) quant à elle a présenté les résultats du projet ANR PREDIMOL: l'utilisation de méthodes QSPR avec des descripteurs *ab Initio*, pour prédire des propriétés de

molécules complexes. les résultats de ces méthodes peuvent compléter de manière utile les bases de données expérimentales.

R. Lugo (IFPEN) a brossé un panorama des différents modèles thermodynamiques disponibles et de leurs applications dans les bio-procédés. Les méthodes de contribution de groupes ainsi que les équations d'état y ont une place importante, mais également des méthodes issues de techniques *ab initio*, comme COSMO.

M. Esteban-Decloux (AgroParisTech) a illustré l'apport de la modélisation de procédé pour la distillation d'eau-de-vie. Bien que ce procédé fonctionne bien depuis des temps très anciens, la simulation a permis de comprendre certains phénomènes et à améliorer l'efficacité tout en gardant la qualité des produits. Le modèle NRTL calé sur des données a permis de décrire un très large spectre de compositions.

H. Romdhana (AgroParisTech) a présenté une étude d'efficacité énergétique du séchage, procédé essentiel dans beaucoup d'applications utilisant la biomasse. L'emploi de vapeur d'eau comme medium a été mis en avant.

Discussions: Lors de la table ronde, des représentants de VEOLIA (F. Nicol) et de SANOFI (JF Trotzier) ont pris la parole en complément aux représentants des trois groupes thématiques organisateurs. Parmi les points soulevés, on remarque qu'il y a deux tendances fortes dans la recherche d'innovation dans l'industrie: 1) la recherche de l'efficacité énergétique et 2) le besoin d'une bonne maîtrise du comportement pour la sélection optimale de nouveaux solvants (issu ou non du végétal) et catalyseurs (enzymatique ou mixte chimique-enzymatique).

La journée a permis d'identifier les acteurs, mais au-delà, la question de formation des ingénieurs de recherche pour qu'ils puissent mieux appréhender le comportement des outils de simulation (tel ProSim) reste d'actualité.

Le besoin de mieux comprendre les interactions entre les différentes échelles est également un point fort auquel il faudra réfléchir.

Jean-Charles de Hemptinne

IFP School Professor

Tuck Foundation Chair "Biofuel Thermodynamics"