

Thermodynamique des phases solides

8 décembre 2014, Paris, Ecole des Mines



GT Thermodynamique des procédés

La conception de nombreux procédés industriels repose sur des équilibres entre phases gazeuse, liquide ou solide, et leur optimisation exige une parfaite maîtrise de la thermodynamique des systèmes hétérogènes.

Cette journée « **Thermodynamique des phases solides** », sous la responsabilité scientifique de **Christelle Goutaudier** et **Christophe Coquelet**, a été animée par le **Professeur Jean-Noël Jaubert**. Une cinquantaine de personnes y ont participé dont certains industriels comme Air Liquide, Calnesis, Material Design, Total, Prosim.

7 intervenants ont exposé leurs travaux sur des thématiques liées à la thermodynamique et au génie des procédés mettant en jeu des phases solides.

Six posters ont été présentés et affichés : ils ont traité les aspects modélisation et expérimentaux de systèmes impliquant des phases solides en condition cryogénique ou en présence d'hydrates de gaz.

La matinée fut consacrée à des présentations assez théoriques. **Christelle Goutaudier**, professeure à l'université Claude-Bernard de Lyon, au cours d'un exposé très pédagogique, a montré la complexité des diagrammes de phases lorsqu'apparaissent des phases solides. Elle a particulièrement souligné l'importance de l'obtention de bonnes données expérimentales pour mettre en évidence les points remarquables de ces diagrammes (eutectiques, péritectiques...)

Puis **Paolo Stringari**, Chargé de Recherche à Mines ParisTech, a exposé comment l'utilisation d'une équation d'état cubique modifiée permettait de représenter de manière très précise le diagramme de phases du système ternaire $\text{CH}_4\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{S}$ très étudié en génie pétrolier et comment les prédictions concordaient avec les nouvelles données expérimentales présentées.

Pierre Cezac, professeur à l'ENSGTI de Pau, a ensuite présenté communiqué les résultats d'un projet financé par Total sur l'étude des dépôts de soufre lors de l'exploitation du gaz naturel. Il a présenté l'équipement développé et le traitement des données obtenues par utilisation d'une approche hétérogène classique et calcul de Flash.

L'exposé de la fin de matinée était celui de **Nicolas David**, chercheur à l'université de Lorraine. Il a présenté la méthode Calphad développée au début des années 1970 qui prévaut dans le domaine de la modélisation numérique des systèmes thermodynamiques complexes et la prédiction de diagrammes de phases comportant plusieurs phases solides.

L'après-midi, **Antonin Chapoy**, chercheur à l'université d'Heriot Watt en Ecosse, a présenté les méthodes de caractérisation des propriétés thermodynamiques de systèmes d'intérêt dans le « oil and gas Engineering » comportant des hydrates de gaz. Il a décrit les modèles classiquement utilisés et les méthodes expérimentales développées dans son laboratoire.

Puis **Nicolas Ferrando**, ingénieur de recherche à l'IFPEN, a montré les résultats de calcul d'équilibre thermodynamique de systèmes riches en CO₂ dans le cadre du stockage géologique du CO₂ dans les aquifères salins. Les phases solides considérées sont le graphite et différents minéraux dont certains constituent des solutions solides. Il a souligné l'importance de disposer de bonnes données expérimentales pour l'optimisation du modèle.

Enfin, **Philippe Ungerer**, expert en thermodynamique de la société Material Design, a présenté les résultats de simulation moléculaire sur la prédiction des propriétés thermodynamiques de solides organique et minéraux des roches sédimentaires. Les propriétés accessibles sont notamment la densité, l'expansion thermique, la capacité calorifique, l'enthalpie de formation, l'énergie libre de formation. Il a également mentionné que les travaux et les méthodes développés pouvaient servir à d'autres applications industrielles comme l'automobile.

Les échanges et les débats très intéressants après chaque conférence ont fait que la table ronde initialement programmée n'a pu avoir lieu. C'est pourquoi les organisateurs du GT envisagent de proposer une nouvelle journée sur cette thématique très prochainement.

Pr. Christelle Goutaudier

Université Claude Bernard  Lyon 1

Pr. Christophe Coquelet



Pr. Jean-Noël Jaubert



Dr Rafael Lugo

