

TRAME DES PAGES AXES

Ce document s'adresse aux responsables et co-responsables des cinq axes de recherche dans le cadre de **la mise à jour des informations** relatives aux pages d'axes. Cette refonte est une opportunité de mettre à l'honneur l'actualité et les changements survenus au cours des dernières années. Vous trouverez ci-après une trame des champs à compléter pour la prochaine version du site ainsi que quelques indications concernant l'illustration de l'en-tête.

- Pour rappel, les pages dédiées aux axes de recherche comprennent également un annuaire des membres de l'axe (géré indépendamment) et un annuaire des thésards – et thèses en cours.
- Ce document est à remplir jusqu'au **31 juillet 2024**. Il peut être retourné à l'adresse suivante : chloe.manchon@univ-lorraine.fr.

Merci à toutes et tous pour votre participation dans la concrétisation de ce projet !

1. TRAME

1.1. Informations générales

Nom de l'axe

CiTherE Cinétique – Thermodynamique – Énergie

Mots clefs (8 maximum)

Pyrolyse, combustion, biomasse/déchets, cycles thermodynamiques, équilibres de phases

Responsables de l'axe

Jean-Noël JAUBERT Professeur jean-noel.jaubert@univ-lorraine.fr
Olivier HERBINET Maître de Conférences olivier.herbinet@univ-lorraine.fr

Présentation générale (500 mots maximum)

Panorama des activités de l'axe comprenant les objectifs scientifiques généraux, la stratégie scientifique de l'axe, les activités de recherche ainsi que les défis scientifiques à relever. Cette présentation peut être agrémentée de faits marquants ou de partenariats significatifs selon les visions de chacun. Elle peut être rédigée ou sous forme de liste.

L'axe CiTherE est constitué de spécialistes en cinétique chimique, thermodynamique et génie de la réaction chimique. Les domaines d'études sont principalement centrés sur l'énergie et ont pour objectif le développement de systèmes énergétiques plus performants, plus économes et plus respectueux de l'environnement, à travers une approche couplant la chimie physique et le génie des procédés. Les travaux expérimentaux et théoriques développés au sein de cet axe conduisent à une approche originale permettant de passer de la compréhension et de la modélisation des phénomènes à l'échelle moléculaire à l'échelle du réacteur ou du procédé.

Les recherches menées s'articulent autour de 3 thématiques :

- la cinétique des réactions de pyrolyse, d'oxydation et de combustion qui recouvre des domaines d'études tels que la formation et l'exploitation du pétrole, la combustion dans les moteurs ou brûleurs, la formation de polluants ou encore la destruction de toxiques chimiques par voie thermique.
- la thermodynamique pour les procédés incluant la thermodynamique des équilibres de phase et l'utilisation rationnelle de l'énergie. Parmi les principaux domaines d'étude, on peut citer le développement d'équations d'état applicables à de larges gammes de procédés industriels, la conception de solvants respectueux de l'environnement pour des opérations d'extraction ou pour des cycles thermodynamiques de puissance ou de réfrigération.
- la conversion thermochimique de la biomasse, notamment la pyrolyse, la gazéification et la liquéfaction pour produire des synthons verts ou des vecteurs énergétiques (gaz de synthèse, carburants liquides). Les recherches couvrent différentes

échelles : 1) l'étude des réactions à l'échelle moléculaire, avec des méthodes d'analyses originales, 2) l'étude des réacteurs (modélisation et essais) et 3) l'analyse environnementale des filières.

1.2. Les thématiques

Cinétique des réactions thermiques : pyrolyse, oxydation, combustion

Présentation de la thématique (300 mots maximum)

Présenter les thématiques et objectifs de recherche.

Les études menées dans cette thématique visent à élaborer des modèles cinétiques détaillés mis en jeu dans les processus de pyrolyse, d'oxydation ou de combustion de composés purement hydrocarbonés ou contenant des hétéroatomes (O, N, S, Cl, ...). Ces modèles permettent d'accéder à des informations chimiques importantes comme la nature et les quantités de polluants formés, les délais d'auto-inflammation, l'effet d'additifs sur la réactivité des carburants ou encore l'évolution de la composition d'un pétrole. Ces études ont conduit à la création d'un logiciel de génération automatique de mécanismes (EXGAS), actuellement adapté aux hydrocarbures ainsi qu'à certains biocarburants (alcools, esters). En parallèle, des mesures expérimentales dans des réacteurs idéaux sont réalisées afin d'obtenir des données nécessaires au développement et à la validation de ces modèles. De même le recours aux méthodes de calculs ab initio permet d'accéder aux constantes de vitesse nécessaires aux simulations.

Compétences

Une section de ce type existe déjà sur le site internet actuel. Il s'agit de mettre à jour la liste des compétences déjà existantes lorsque cela est nécessaire.

- Étude expérimentales des réactions de pyrolyse/combustion en réacteurs idéaux (réacteur auto-agité par jets gazeux, brûleurs à flamme plate, tube à onde de choc, réacteurs batch et piston,...)
- Techniques analytiques pour la quantification des produits de réactions, (GC, GC-MS, CRDS, IRTF)
- Génération automatique de mécanismes cinétiques détaillés (EXGAS) et simulations numériques (*Chemkin-Pro*)
- Détermination de constantes de vitesse et de données thermodynamiques ($D_{\text{H}}^{\circ 298\text{K}}$, $S^{\circ 298\text{K}}$, $C_p^{\circ}(T)$) à partir de méthodes de chimie quantique (*gaussian*, *molpro*) et de théories cinétiques.

Équipements Principaux

Légende : GCR tube à onde de choc



Légende : Tubes en or chargé en hydrocarbures, fermés et placés dans une autoclave. Domaine expérimental : 300 – 500°C 1h – plusieurs jours 1 bar – 700 bar



Légende : GCR Jet Stirred Reactor



Thermodynamique des procédés

Présentation de la thématique (300 mots maximum)

Présenter les thématiques et objectifs de recherche de l'équipe.

Les logiciels de simulation (suite Aspen, Simulis, PRO/II) sont au cœur de l'optimisation et de la conception des procédés et requièrent des modèles thermodynamiques capables de prédire les équilibres de phases et les propriétés énergétiques sans avoir recours à des données expérimentales. Pour répondre à cette demande, nous développons plusieurs modèles utilisant le concept de contributions de groupes de sorte que la seule connaissance de la structure chimique des molécules présentes dans un mélange permet de prédire ses propriétés. Nous réalisons également des mesures expérimentales (ébulliométrie, chromatographie, densimétrie, mesures de points critiques, etc.) pour caractériser le comportement thermodynamique des corps purs et des mélanges. Un de nos objectifs est de mettre

en œuvre une approche *thermo-environnementale* pour concevoir des procédés éco-efficients (utilisant des solvants verts) et énergétiquement optimisés.

Compétences

Une section de ce type existe déjà sur le site internet actuel. Il s'agit de mettre à jour la liste des compétences déjà existantes lorsque cela est nécessaire.

- Développement d'équations d'états innovantes et prédictives pour une simulation précise des procédés (de l'industrie chimique ou de conversion énergétique).
- Développement d'algorithmes couplant résolution des conditions d'équilibre entre phases et analyse de stabilité.
- Détermination expérimentale de diagrammes de phases, de coefficients d'activité à dilution infinie, de densités, de capacités calorifiques, d'enthalpies.
- Utilisation de l'approche product-design pour la conception de solvants néotériques tels les liquides ioniques ou de nouveaux fluides de travail pour cycles thermodynamiques.

Le modèle PPR78

Possibilité d'inclure la liste des équipements scientifiques à la disposition de l'équipe. La liste peut être illustrée par des photos desdits équipements lorsque cela est possible.

PPR78 est l'acronyme anglais de Predictive Peng-Robinson 1978. Ce modèle utilise l'équation d'état de PENG-ROBINSON dans sa version de 1978, les règles de mélange de VAN DER WAALS, et suppose que le coefficient d'interaction binaire k_{ij} est uniquement fonction de la température T . La méthode est rendue prédictive par le calcul de k_{ij} à partir d'une méthode de contributions de groupes.

[\(PRÉVOIR RENVOI VERS UN FICHER PDF TÉLÉCHARGEABLE\)](#)

Conversion thermochimique de la biomasse

Présentation de la thématique (300 mots maximum)

Présenter les thématiques et objectifs de recherche de l'équipe.

Les activités de recherches associées à cette thématique reposent sur une approche multi-échelle qui traite des mécanismes moléculaires aux réacteurs jusqu'à l'analyse globale des procédés.

À l'échelle moléculaire, nous étudions les mécanismes de pyrolyse et de liquéfaction de la biomasse et de ses constituants (cellulose, lignine, etc.). Nous étudions également les réactions catalytiques de désoxygénation de la biomasse et d'oxydation du charbon. A l'échelle du réacteur, nous étudions les lits fluidisés (essais de 1g à 10kg/h au LRGP) et des réacteurs de pyrolyse/liquéfaction de la lignine et des déchets. A l'échelle du procédé, nous développons des modèles sous le logiciel Aspen Plus afin de prédire les bilans matière et énergie des filières, en associant la mobilisation de la ressource (transport, prétraitement) jusqu'à l'émission des polluants. Ces données permettent de conduire des analyses environnementales des filières.

Compétences

Une section de ce type existe déjà sur le site internet actuel. Il s'agit de mettre à jour la liste des compétences déjà existantes lorsque cela est nécessaire.

- Pyrolyse - gazéification de la biomasse et des déchets
- Liquéfaction de la biomasse, celluloses et lignines
- Lits fluidisés
- Analyse des goudrons par spectrométrie de masse en ligne, par chromatographies en phase gazeuse et liquide
- Pyrolyse catalytique
- Reformage catalytique du méthane et des goudrons
- Dépolymérisation sélective des polymères
- Réactions et réacteurs catalytiques d'hydrotraitement

- Caractérisation et réactivité des carbones (charbon, coke, etc.)
- Réacteurs thermochimiques solaires

Équipements Principaux

Possibilité d'inclure la liste des équipements scientifiques à la disposition de l'équipe. La liste peut être illustrée par des photos desdits équipements lorsque cela est possible.

Bancs d'essais

- Pilote cyclone
- Pilote lit fluidisé
- Micro lit fluidisé couplé lits catalytiques
- Réacteur bis-vis
- Four à image
- Couplage réacteur de pyrolyse et réacteur parfaitement agité ou lit fixe
- Installation de pyrolyse sous laser
- Lit fixe gaz/solide à très haute température (1800°C)
- Lit fixe gaz/solide pour la catalyse
- Thermobalance couplée calorimétrie

Moyens analytiques

- Analyse des gaz : plusieurs μ GC, nombreux GC
- Analyse des liquides : LC/MS-UV-RID, GC*GC/FID-MS, Karl Fisher
- Analyse des solides : Sorption de N₂, porosité Hg, analyse élémentaire, ICP-MS, MEB, Raman, etc.

Modélisation

- Modèles cinétiques (échelle moléculaire) sous CHEMKIN
- Modèles de grains (échelle particule) : modèles couplés transferts de chaleur, de matière et réactions
- Modèles de réacteurs : modèles couplés hydrodynamiques, transferts et réactions
- Modèles de procédés sous ASPEN Plus : modélisation détaillée des réacteurs par couplage avec Fortran