

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

PRIMO Procédés Réacteurs Intensification Membranes Optimisation

Mots clefs (8 maximum)

Procédés membranaires, Procédés catalytiques, CCU : Capture et utilisation du carbone, Intensification, Synthèse de procédés

Responsables de l'axe

Sabine RODE Professeure UL sabine.ode@univ-lorraine.fr
Jean-François PORTHA Maître de Conférences HdR UL jean-francois.portha@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.

Le défi climatique ainsi que l'atteinte des limites planétaires pour de nombreuses matières premières requièrent une transition énergétique nécessitant d'adapter, voire de reconsidérer, de nombreux procédés de transformation de la matière et de l'énergie. La gestion des ressources en eau douce, la capture et l'utilisation du carbone et l'amélioration de l'efficacité énergétique des procédés sont plus particulièrement au cœur des préoccupations actuelles de l'industrie. Ces grands domaines d'étude occupent une place centrale dans les recherches menées au sein de l'axe PRIMO.

L'axe est structuré en deux équipes, STREAM (séparations, transferts, réactions, énergie et matière) et PRISME (procédés, réacteurs, intensification, synthèse de procédés, membranes). L'activité scientifique des équipes peut être subdivisée en trois thématiques. Les deux premières regroupent les familles de procédés principalement étudiées au sein de l'axe : les procédés membranaires et les procédés catalytiques fluide-solide. La troisième thématique rassemble les activités de développement méthodologique menées dans le domaine de l'intensification et de la synthèse de procédés. Ces méthodologies sont principalement, mais pas exclusivement, appliquées aux procédés membranaires et catalytiques.

L'approche scientifique développée est multi-échelle, allant de l'échelle moléculaire à celle du procédé dans sa globalité. Des études théoriques, numériques et expérimentales sont étroitement associées. L'objectif scientifique est d'approfondir la compréhension des différents phénomènes mis en jeu et de leurs éventuelles interactions, afin d'optimiser la conception et l'opération des procédés. Les

phénomènes considérés sont les suivants : hydrodynamique des écoulements mono- et polyphasiques, réactions chimiques, équilibres thermodynamiques, transfert de matière et de chaleur.

La modélisation et la simulation de l'évolution spatio-temporelle des grandeurs physiques requiert le développement d'outils de calcul dédiés. En plus de la création de codes de calcul utilisant des langages techniques comme *Matlab* et *Python*, de nombreuses études sont menées en utilisant des logiciels commerciaux adaptés à la problématique et à l'échelle étudiée, *Comsol* et *Fluent* pour la modélisation fine des opérations par mécanique des fluides numérique, *Aspen Hysys*, *Proll* et *ProSimPlus* pour la simulation des procédés, couplés à *Midaco* pour la synthèse de procédés assistée par ordinateur. L'axe PRIMO dispose par ailleurs d'appareils de mesure et d'analyse dédiés, ainsi que d'un ensemble d'installations pilote, permettant de mener des études expérimentales aux différentes échelles.

Parmi les faits marquants, il convient de mentionner la reconduite de deux laboratoires communs, MELUSINE avec EDF, qui s'intéresse principalement au traitement des effluents liquides, et PIGAZ avec Air Liquide, dont le sujet principal est la production et le traitement des gaz industriels. Parmi les projets nationaux en cours on peut citer le PEPR IMOSYCCA traitant de la capture du CO₂ par contacteur membranaire et l'ANR ISARD dont l'objet est l'intensification de la synthèse de NH₃ en régime dynamique. L'équipe participe également au projet européen M2ARE, qui étudie la synthèse de méthanol à partir de CO₂ biogénique pour le transport maritime. Enfin le développement de codes de calcul dédiés aux procédés membranaires a donné lieu à la création de la start-up, MEMSIC.

1.2. Les thématiques

Procédés membranaires

Présentation de la thématique (300 mots maximum)

Présenter les thématiques et objectifs de recherche.

Les procédés membranaires sont des procédés de séparation de mélanges impliquant l'utilisation d'un film polymère ou inorganique, qui peut être dense ou microporeux, la membrane. Selon les caractéristiques de la membrane, on peut séparer des mélanges monophasiques, gaz ou liquide, ou diphasiques, liquide-solide. Pour la séparation de mélanges monophasiques, les procédés membranaires constituent une alternative aux procédés de séparation moléculaire conventionnels. Leurs principaux avantages sont une faible consommation d'énergie, comparé à la distillation, et une mise en œuvre simple, comparé à l'adsorption. Grâce à leurs qualités intrinsèques, les procédés membranaires connaissent un essor important et leur domaine d'utilisation en milieu industriel est en constante et forte augmentation.

On distingue différents procédés membranaires, selon la taille des constituants à séparer, la nature physique de la force motrice permettant de franchir la barrière membranaire et l'état physique des fluides circulant de part et d'autre de la membrane. Des procédés membranaires variés sont étudiés au sein de l'axe PRIMO. La liste ci-dessous de sujets abordés, non exhaustive, en donne un aperçu.

- Perméation de gaz pour la séparation de gaz industriels en général et pour la capture du CO₂ en particulier.
- Contacteurs membranaires gaz-liquide pour la capture du CO₂ et le dégazage et la désolvation d'effluents industriels.
- Contacteurs membranaires liquide-liquide pour la purification de composés phénoliques issus de bio-huiles.
- Nanofiltration pour la récupération sélective de colorants dans le traitement d'effluents liquides de l'industrie textile.
- Osmose inverse pour le traitement d'effluents de l'industrie nucléaire.
- Distillation membranaire pour le dessalement des eaux saumâtres.

L'objectif des recherches menées au sein de l'axe PRIMO est de développer de nouveaux procédés membranaires ou d'intensifier les procédés existants. Ceci passe par la modélisation des phénomènes impliqués à toutes les échelles, partant des mécanismes moléculaires, passant par l'hydrodynamique et les transferts puis allant jusqu'à l'architecture de l'ensemble du procédé. Des procédés multifonctionnels et hybrides sont également envisagés.

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.

- Conception, synthèse et caractérisation de membranes polymères.

- Caractérisation des propriétés de transfert de membranes polymériques et inorganiques.
- Modélisation de procédés de perméation gazeuse, osmose inverse, distillation membranaire.
- Mécanique des fluides numérique (CFD) pour la modélisation avancée des procédés membranaires.
- Contacteurs membranaires gaz-liquide et liquide-liquide.
- Architecture de procédés membranaires.
- Procédés multifonctionnels et hybrides impliquant des séparations membranaires.

Équipements Principaux

Microbalance à suspension magnétique pour la mesure de coefficients de sorption du CO₂ sur différents matériaux.

Installation time-lag, permettant la mesure de la solubilité et de la diffusivité au sein de différents matériaux membranaires.

Installations pilote de perméation de gaz permettant de tester des membranes polymériques et inorganiques.

Installations pilote de captage de CO₂ utilisant des contacteurs membranaires.

Installation pilote de nanofiltration.

1.1. Les thématiques

Procédés catalytiques gaz-solide et liquide-solide

Présentation de la thématique (300 mots maximum)

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

Les procédés de catalyse hétérogène fluide-solide représentent la majorité des procédés réactifs de l'industrie et leur maîtrise est fondamentale pour mener à bien la transition vers une industrie durable. Le développement de nouveaux procédés dans une approche multi-échelle constitue une priorité thématique de l'axe PRIMO, tout particulièrement les procédés clés de la transition énergétique, tels ceux basés sur l'hydrogène et la valorisation de CO₂. Les applications étudiées concernent l'utilisation de l'hydrogène pour la mobilité, la micro-cogénération ou la production de e-fuels (filère Power-to-Chemicals) et la séparation et la valorisation du CO₂ dans une logique d'ingénierie circulaire. De nombreux défis doivent être relevés pour développer ces nouveaux procédés : réduction de leur empreinte spatiale et environnementale, augmentation de la modularité des équipements, nécessité d'une production décentralisée et gestion du caractère intermittent des flux de matière et d'énergie entrants.

D'un point de vue méthodologique, les travaux menés à l'échelle du catalyseur consistent d'une part à développer, sur la base de résultats expérimentaux, des modèles cinétiques exploitables aux échelles supérieures, et d'autre part, à synthétiser et à caractériser ces matériaux catalytiques, ceci en partenariat avec d'autres axes du LRGP, voire avec d'autres laboratoires. Dans ce cadre, une installation pilote permettant de tester la performance et la stabilité des matériaux catalytiques a été construite au LRGP en 2023-2024. Les travaux de modélisation et d'optimisation des réacteurs à l'échelle de l'équipement intègrent les phénomènes cinétiques, thermodynamiques, et hydrodynamiques et de transferts de matière et de chaleur. Ces modèles sont intégrés dans des modèles de procédé complets, afin de calculer des indicateurs de performance globaux (coût de production, efficacité énergétique, impact environnemental, etc.) et d'identifier par la suite l'architecture optimale du procédé, c.à.d. celle permettant de minimiser/maximiser ces indicateurs.

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.

- Synthèse et caractérisation de matériaux catalytiques.

Etablissement de modèles et identification des paramètres cinétiques.

Modélisation et optimisation de réacteurs catalytiques fluide-solide.

Mécanique des fluides numérique (CFD) pour la modélisation avancée des réacteurs catalytiques.

Simulation et optimisation de procédés catalytiques (CAD).

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.

- Installation pilote de mesure des performances et de la stabilité des matériaux catalytiques.
- Calorimètre.

1.1. Les thématiques

Intensification et synthèse de procédés

Présentation de la thématique (300 mots maximum)

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

L'intensification, définie comme l'ensemble des technologies et méthodes permettant d'augmenter la productivité volumique, et la synthèse des procédés, vue comme l'agencement optimal des opérations unitaires, font partie des méthodologies scientifiques de l'axe. Elles visent la conception de nouveaux appareillages et de procédés innovants dans un souci d'optimisation des efficacités technique et énergétique.

Les principales stratégies d'intensification développées au sein de l'axe sont les suivantes.

- Structuration géométrique et miniaturisation des équipements permettant la mise en œuvre des transferts ou de la réaction.
- Passage de procédés discontinus aux procédés continus.
- Conception d'appareils multifonctionnels, réacteur-échangeur compact ou réacteur-séparateur, permettant de tirer profit d'éventuelles synergies.

La synthèse de procédés est une thématique scientifique importante de l'axe PRIMO et d'intérêt pour le LRG dans son ensemble, étant donné les multiples applications possibles. Les travaux menés consistent d'une part à déterminer l'architecture et les conditions opératoires optimales d'un procédé par optimisation de superstructures sur la base d'indicateurs de performance. D'autre part, des méthodes évolutionnaires, sont développées pour identifier des structures de procédés ab initio. Afin de limiter les temps de calcul des algorithmes d'optimisation, des approches utilisant l'apprentissage automatique (machine learning) ainsi que les méthodes de graphes sont employées.

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.

Conception de procédés par optimisation de superstructures ou méthodes évolutionnaires.

Analyse d'intensifiabilité de réacteurs et de procédés.

Mécanique des fluides numérique (CFD) pour la modélisation avancée de systèmes mono- et polyphasiques.

Structuration et optimisation de forme d'équipements mono- ou multifonctionnels.

Intensification des opérations de transfert par réaction chimique.

Méthodologies d'intensification pour l'acquisition de données et la production industrielle.

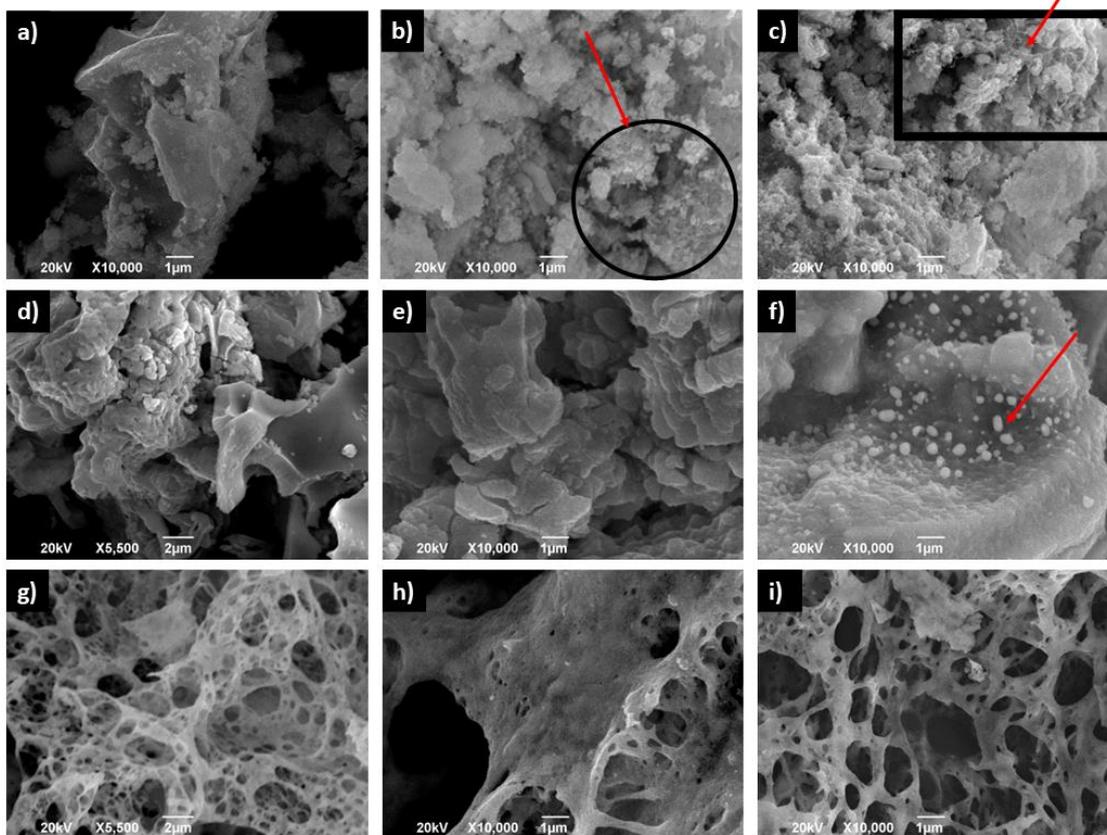
Équipements Principaux

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.

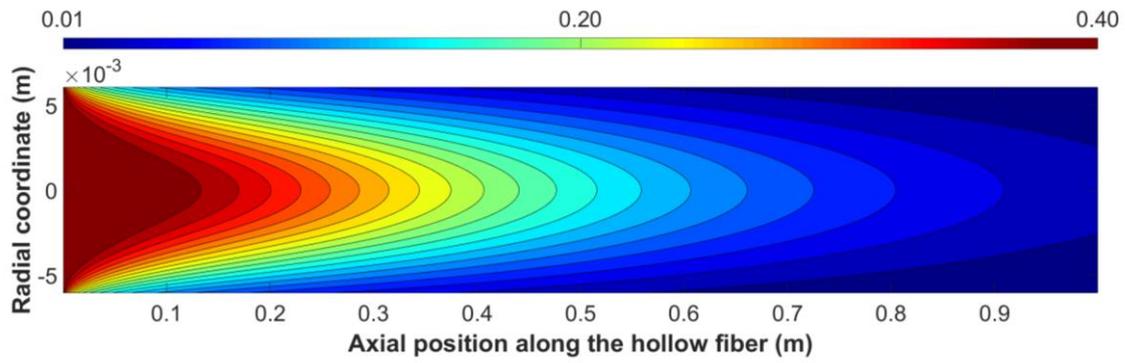
- Banc de caractérisation thermo-hydraulique de réacteurs et d'échangeurs de chaleur.
- Installation pilote pour l'étude d'évaporateurs structurés.

Illustrations possibles

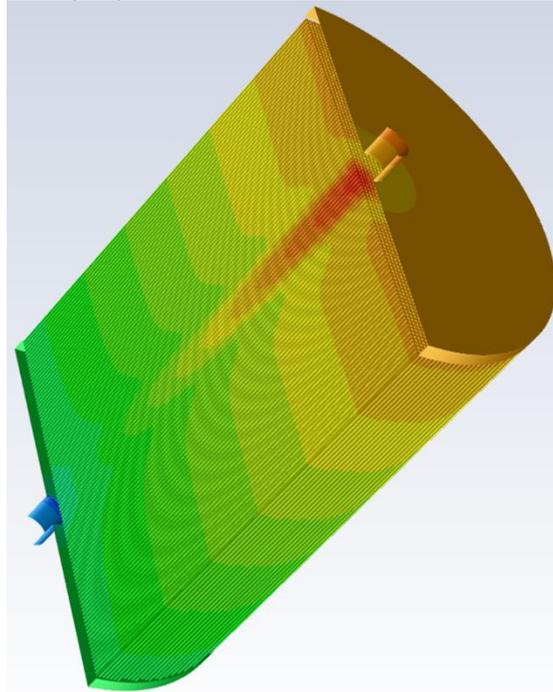
Procédés catalytiques : clichés d'un catalyseur de type perovskite réalisés pour le réformage à sec du méthane



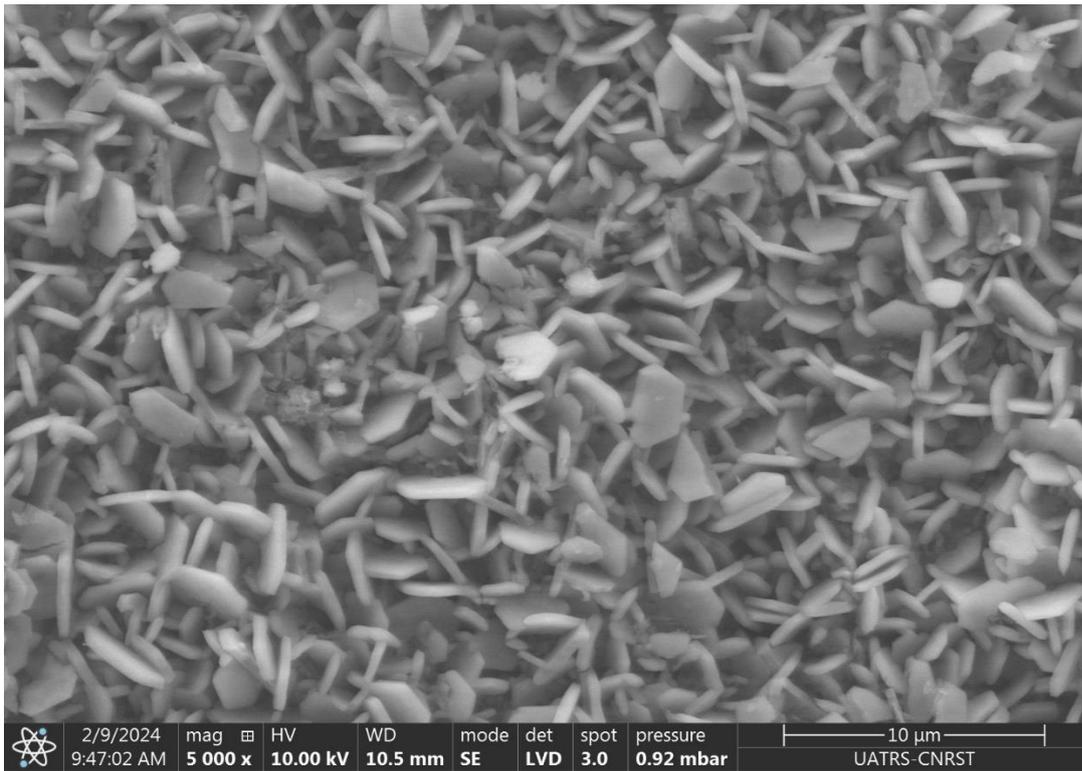
Procédés membranaires : Champ de fraction molaire de CO_2 dans une fibre creuse pour la purification du biogaz



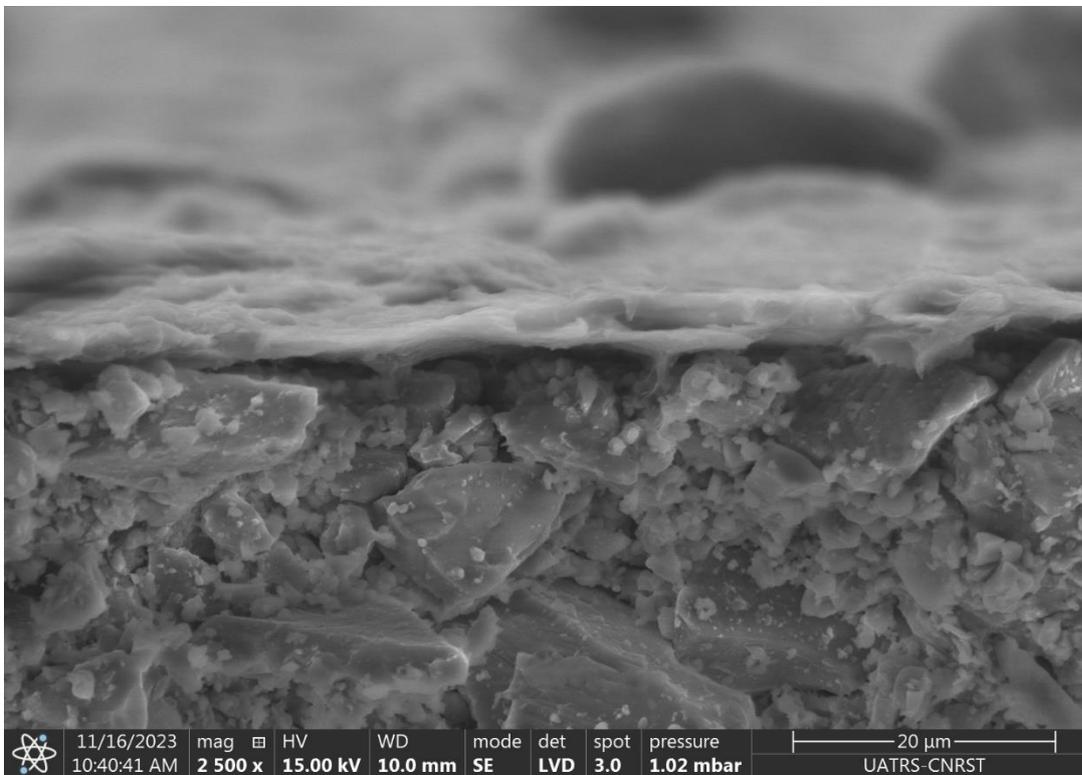
Procédés membranaires : Champ de pression dans un contacteur membranaire à fibres creuses calculé par MFN



Procédés membranaires : Cliché au MEB de feuillets de MoS₂



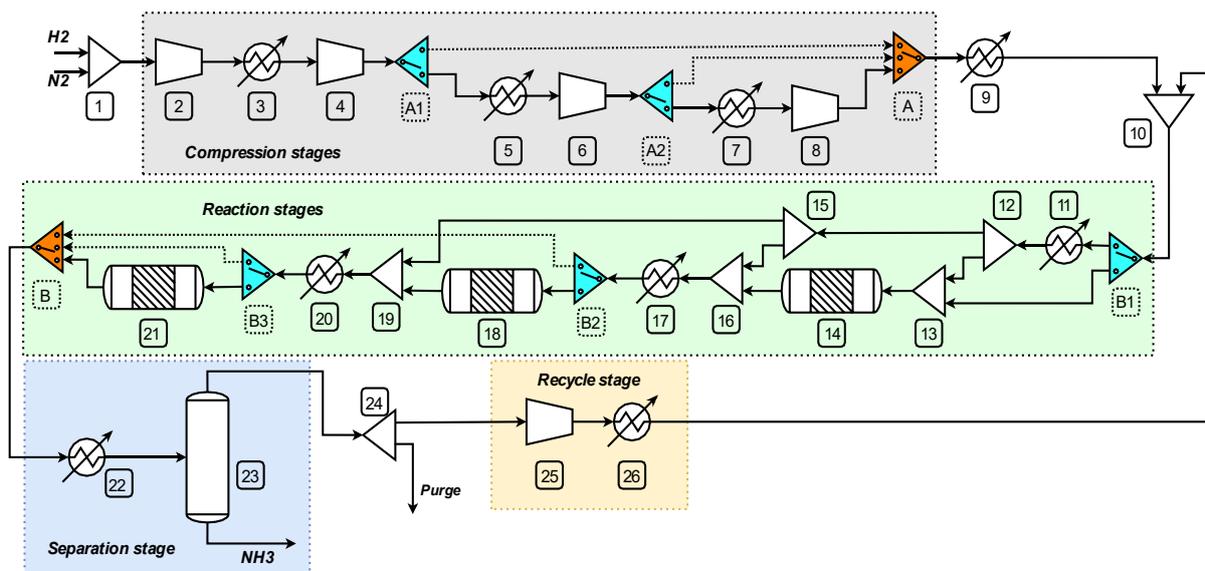
Procédés membranaires : Cliché au MEB d'une membrane inorganique avec une peau dense composite



Procédés catalytiques : unité pilote d'un procédé de vaporéformage avec microréacteur pour validation et démonstration



Intensification et synthèse : optimisation du procédé de synthèse de NH_3 utilisant des superstructures



Intensification et synthèse : optimisation multicritères du procédé de synthèse de NH_3 pour le stockage de l'énergie renouvelable

