

Le calcul numérique, accélérateur de solutions durables dans la chimie et les polymères

CESE - CGIET

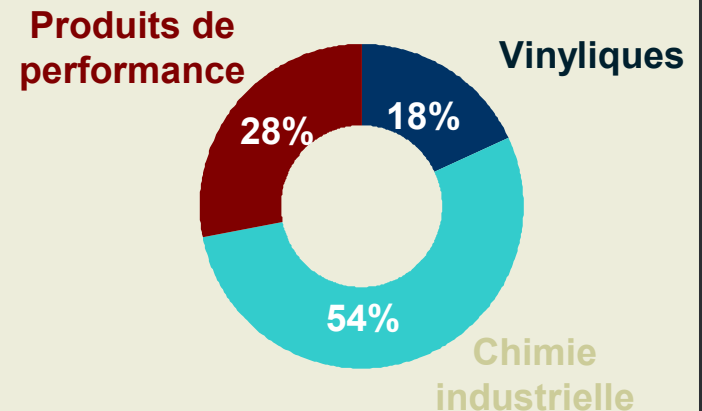
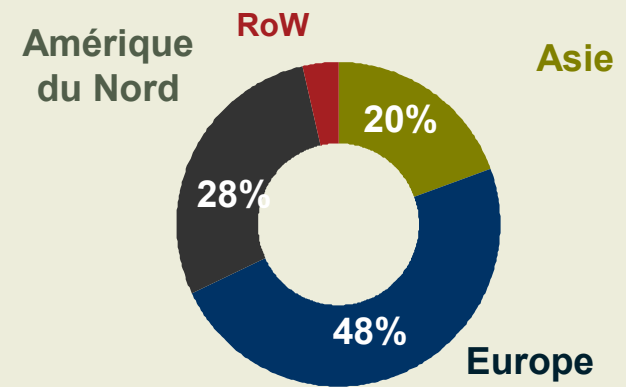
Nicolas de Warren

25 novembre 2011



Arkema, un leader de la chimie à vocation mondiale

- Chiffre d'affaires 2010 : 5,9 G€
- EBITDA: 790 M€
- Investissements : 5 % du CA
- R&D : 3 % du CA, 9 centres de R&D
- 1500 p., 150 brevets / an
- 80 sites industriels dans 40 pays
- 15 700 salariés



Arkema, un développement au cœur des solutions pour le développement durable

» développer les matériaux du futur :

- efficacité énergétique et énergies renouvelables
- matériaux nano-structurés - chimie supramoléculaire
- matières premières renouvelables



batteries Ion-Li
supercapacités



cellules
photovoltaïques



Polyamides issus de
ressources renouvelables



Bitumes additivés de
polymères
"supra-moléculaires"
d'origine végétale



verres climato-
adaptables



transparence
fonctionnelle

- ›› **niveau micro / nanoscopique**: l'acquisition des propriétés physiques et thermodynamiques des corps: catalyseurs, réactions... propriétés (explosivité, toxicité, rigidité...)
- ›› l'accompagnement des phases de pilotage
- ›› **niveau mésoscopique**: l'aide à la conception (CFD / simulation des réactions) - de plus en plus complexes: réacteurs agités multiphasiques
- ›› **niveau macroscopique**: la virtualisation des ateliers (modélisation / maquettes de conception 3D) - intégrer les contraintes d'exploitation (cycles, maintenance, gestion des flux) dans la conception
- ›› la formation des opérateurs


=> vers la modélisation multi-échelles

**=> vers la modélisation multi-fonctionnelle
intégrée**

Modélisation et simulation: bénéfiques...et limites

- ›› raccourcissement des phases de développement
- ›› réduction du *Time to market*
- ›› gains de performance dans l'innovation
- ›› *boost* des performances des autres outils (screening ultra-rapide, robotique, unités-pilotes)
- ›› gains de compétitivité

- pas de conception d'unité totalement virtuelle
- à défaut de pouvoir faire l'économie des phases de pilotage, les réduire et les optimiser



**Modélisation et
simulation: mieux
comprendre et donc
mieux répondre, en
plus grande sécurité**



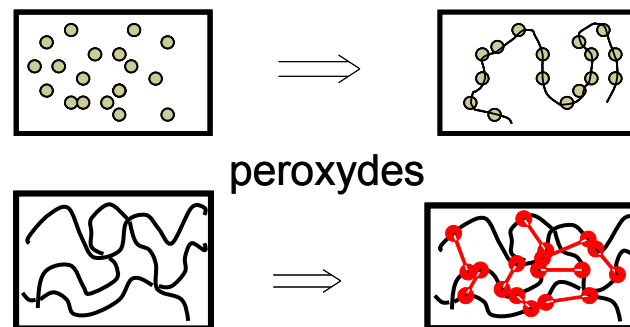
Modélisation et simulation des réactions

Exemple des peroxydes organiques

les peroxydes organiques sont des **initiateurs de réaction** qui permettent de fabriquer polymères (matières plastiques) et élastomères (caoutchoucs)



les peroxydes organiques permettent d'assembler des motifs moléculaires (monomères) pour former des longues chaînes polymères ou élastomères



composés réactifs qui se décomposent avec la température et très exothermiques

nécessité de **simuler les réactions à l'utilisation** (fabrication de pièces polymères ou élastomères) **et pour la sécurité** (conditions de stockage et de transport...)

Modélisation et simulation des réactions

Exemple des peroxydes organiques

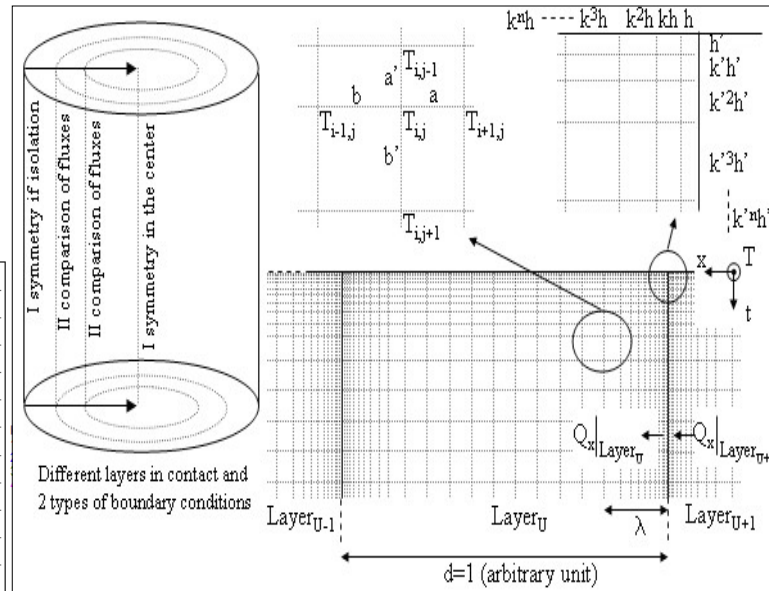
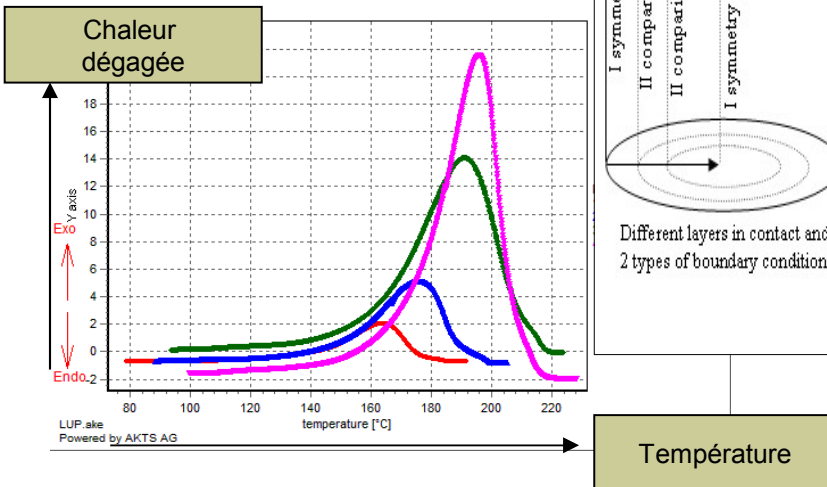
De quelques milligrammes au niveau du laboratoire
... à plusieurs tonnes ...

détermination des conditions d'emballage, de transport et de stockage sûres

En toute sécurité !

mise en œuvre de **modèles** plus ou moins évolués - **simulation des cas extrêmes**

caractérisation expérimentale de la stabilité thermique des peroxydes organiques



Modélisation

contrôle en ligne des procédés de polymérisation

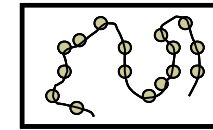
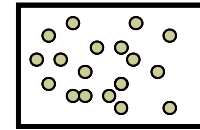
Le contrôle ex-post de la polymérisation est cher, tardif et imparfait



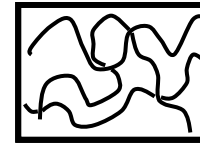
approche spectroscopique vibrationnelle sur base NIR



Construction d'un **modèle de corrélation** qui permet de corréler une **signature vibrationnelle / numérique** avec une **propriété**



polymérisation



obtention en ligne d'un signal avec « signature » du produit très riche: humidité, avancée de la réaction, terminaison moléculaire, rigidité...

Le calcul numérique permet de **transformer une mesure en un panel de propriétés**

Modélisation

vers l'éco-conception des polymères



Ex: la chaussure
Adidas SOCCER
la plus légère au
monde !

1^{er} axe de l'éco-conception: **choix de matériaux optimisé**
sur les **trois propriétés critiques** d'un polymère :

légèreté - rigidité - dimension / épaisseur


composite thermoplastique (polymère + fibres minérales):
modélisation pour **optimiser les paramètres à l'injection**:
répartition des fibres => prédiction mécanique

2^{ème} axe de l'éco-conception: **la fin de vie / le ré-usage** :
passera par une nouvelle extrusion

Simuler pour comprendre le changement de phase
liquide / solide (« plastification ») => calculs d'écoulement
=> **optimiser les profils de vis d'extrusion et les
conditions opératoires**

Ex: un gain de 30% de
capacité sur une
extrudeuse sans aucun
investissement !

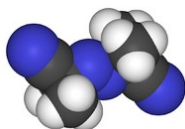
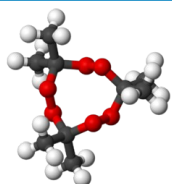
- **Modélisation des propriétés** par méthode de contribution de groupes : prédiction des indices de réfraction, anticipation du retrait lors de la cuisson du revêtement, corrélation propriétés barrières et paramètres de solubilité
- **Simulation des procédés** : colonne à distiller, colonne extraction liquide/liquide, échangeurs thermiques – Calcul à partir des données de propriétés physiques, thermodynamiques et des coefficients d'interaction (logiciel ASPEN, HTFS)
- Développement d'un **logiciel de commande prédictive** pour le suivi de réactions exothermiques en batch : anticipation de la cinétique de réaction et commande automatique de l'ajout des réactifs en fonction de l'avancement de la réaction



**Modélisation et
simulation: préparer
la substitution des
produits à haut
risque...**



Règlement européen REACH



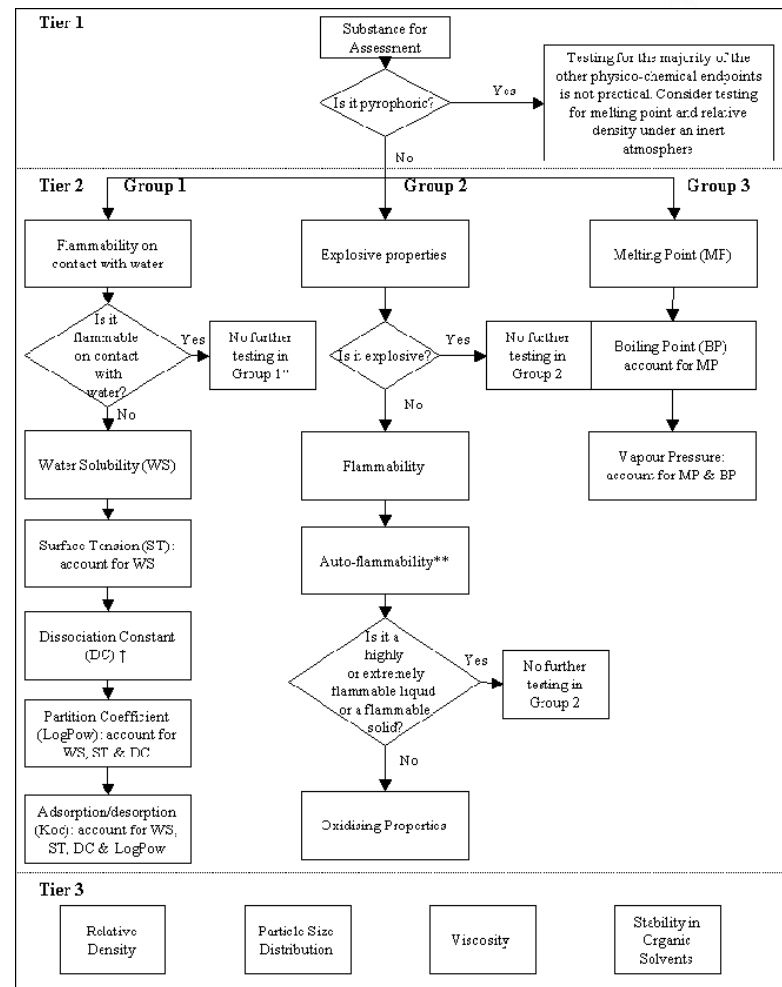
Obligation de la détermination expérimentale des propriétés physico-chimiques des substances

Température de fusion, d'ébullition, tension de vapeur, densité, tension superficielle, hydrosolubilité, coefficient de partage n-octanol / eau, point d'éclair, inflammabilité, température d'auto-inflammation, propriétés explosives, propriétés comburantes, stabilité dans les solvants organiques et identité des produits de dégradation, constante de dissociation, viscosité, granulométrie

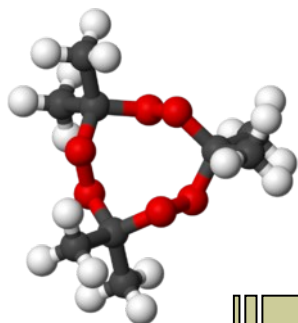
De nombreuses substances...
de nombreuses propriétés...



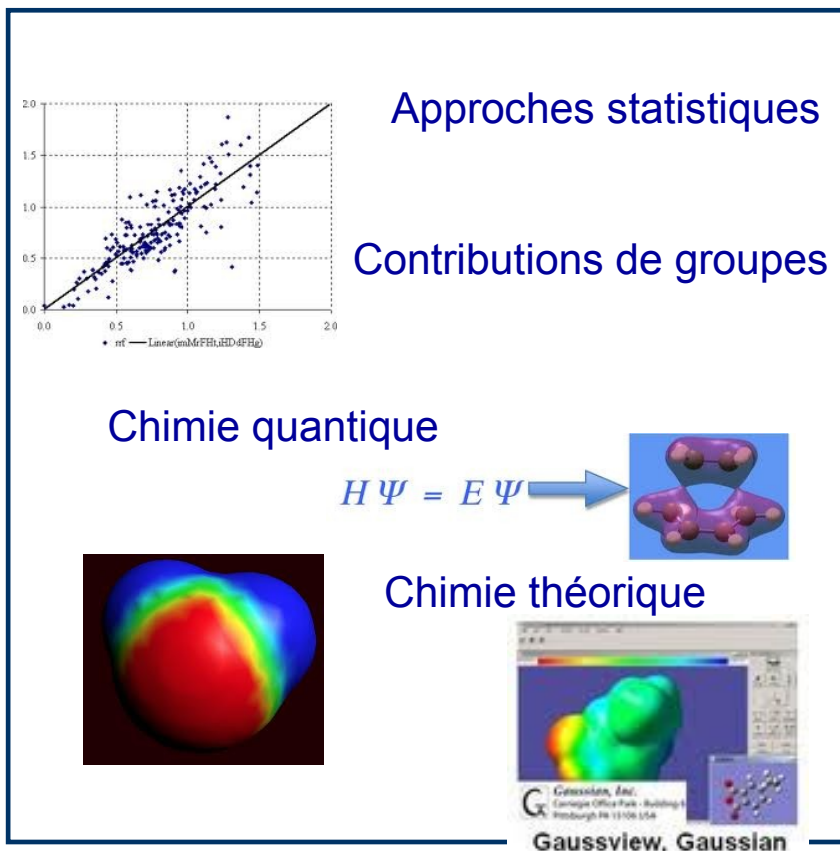
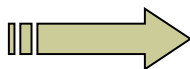
un travail soutenu pour satisfaire à la réglementation...



Prédiction des propriétés physico-chimiques par modélisation moléculaire



Une molécule à caractériser



Approches statistiques

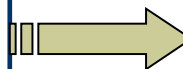
Contributions de groupes

Chimie quantique

$$H\Psi = E\Psi$$

Chimie théorique

Gaussview, Gaussian



des propriétés prédites et estimées

démarche également valorisable au stade de la recherche de nouvelles molécules

Programme ARKEMA - INERIS soutenu par l'ANR



Modélisation et simulation: économiser l'énergie...



la modélisation de réfrigérants: un premier enjeu énergétique

Les installations de réfrigération et de conditionnement d'air représentent plus de 10% de la consommation énergétique française

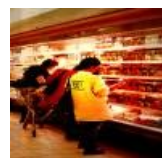
- de multiples applications :



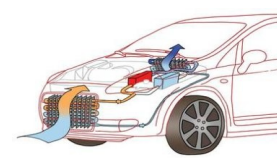
froid industriel



transport



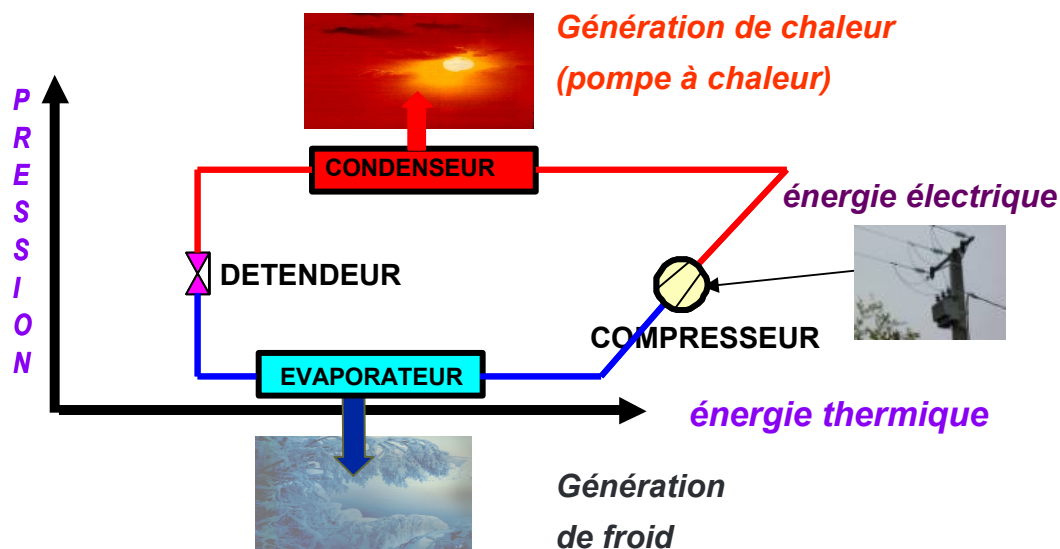
commercial



air-conditionné mobile, fixe



- via une technologie performante: la compression de vapeur

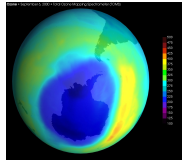


Le réfrigérant génère l'énergie thermique (froid ou chaud) et conditionne le rendement énergétique de l'installation:

$$\text{Rendement} = \frac{\text{énergie thermique}}{\text{énergie électrique}}$$

la modélisation de réfrigérants: deux autres enjeux: substitution et développement durable

L'évolution réglementaire sur l'ozone et le réchauffement climatique : nouveaux réfrigérants

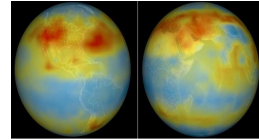


Protocole de Montréal :
L'ozone stratosphérique



Protocole de Kyoto :

Le réchauffement climatique



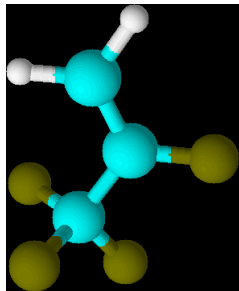
1ère génération

2ème génération

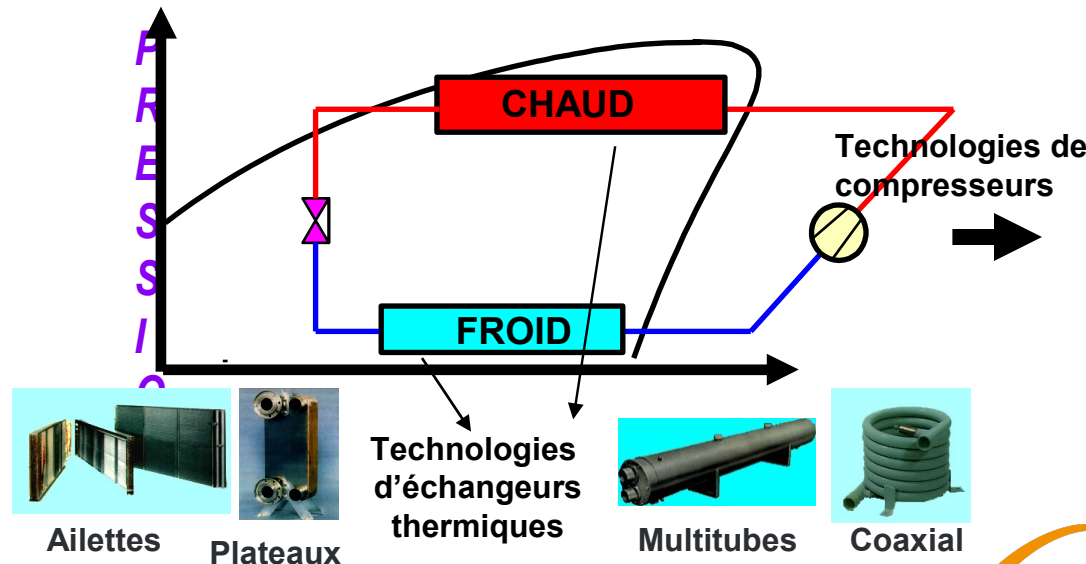
3ème génération

4ème génération

la modélisation des réfrigérants est nécessaire à la conception des composants d'un circuit frigorifique (compresseurs, échangeurs) pour le meilleur rendement énergétique possible



Modélisation des propriétés thermodynamiques



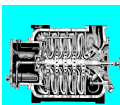
Piston



spiro orbital



vis



Centrifuge