



# CHIMIE DURABLE ET INTENSIFICATION DES PROCÉDÉS

Pour un génie des procédés moderne  
et « vert »

# SOMMAIRE

<b>SOMMAIRE</b>	<b>2</b>
<b>AVANT-PROPOS</b>	<b>3</b>
<b>CONTEXTE</b>	<b>4</b>
<b>GLOBALISATION DES MARCHÉS ET CONSCIENCE SOCIÉTALE</b>	<b>5</b>
<b>APPROCHE MULTIÉCHELLE DE TEMPS ET D'ESPACE</b>	<b>7</b>
<b>DÉVELOPPEMENT DURABLE</b>	<b>9</b>
CONTRÔLE TOTAL MULTIÉCHELLE DU PROCÉDÉ	<b>9</b>
INTENSIFICATION DES PROCÉDÉS	<b>10</b>
GÉNIE DU PRODUIT : ÉLABORATION DES PROPRIÉTÉS D'USAGE ET FABRICATION DU PRODUIT	<b>10</b>
GÉNIE DU PROCÉDÉ : MODÉLISATION ET SIMULATION INFORMATIQUE	<b>11</b>
<b>POUR EN SAVOIR PLUS</b>	<b>13</b>



## AVANT-PROPOS

Le génie des procédés moderne "vert" concerne l'ensemble des sciences et technologies qui permettent les transformations physico-(bio) chimiques optimales des matières premières et des énergies en produits utiles aux consommateurs. Cependant, il se doit de répondre aux besoins des industries chimiques et annexes : compétitivité, satisfaction de la demande économique changeante et respect des contraintes sociales et environnementales des procédés industriels. Tous ces aspects requièrent une approche multi-échelle fortement mobilisée sur l'intensification des procédés et sur le génie du couple produits verts/procédés verts, l'objectif étant de produire beaucoup plus et mieux, en consommant beaucoup moins, et de façon plus durable.

Ce livre blanc est un extrait de l'article Génie des procédés, développement durable et innovation. Enjeux et perspectives rédigé par Jean-Claude CHARPENTIER [J500]. Retrouvez l'intégralité de l'article sur :

<http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/procedes-chimie-bio-agro-th2/industrialisation-des-procedes-defis-et-nouvelles-approches-42602210/genie-des-procedes-developpement-durable-et-innovation-j500/>

# CONTEXTE

Le génie des procédés concerne l'ensemble des sciences et technologies qui permettent les transformations physico-(bio)chimiques optimales des matières premières et des énergies en produits utiles aux consommateurs.

Pour répondre aux besoins des industries chimiques et annexes qui doivent satisfaire à la fois des demandes économiques changeantes et rester mondialement compétitives, le génie des procédés moderne doit appréhender à la fois la **demande des marchés** pour des produits à propriétés d'usage définies aux nano et micro-échelles de temps et d'espace et les **contraintes sociales et environnementales** des procédés industriels aux échelles méso et macro de production. Il doit répondre au défi de proposer des procédés comportant des technologies durables pour des **produits verts** : *sustainable technology for green product*.

Nous verrons que cela requiert une démarche scientifique comportant une approche système intégré multidisciplinaire et multiéchelle de longueur et de temps, appliquée aux différents processus moléculaires et de transferts souvent cou-

plés qui interviennent aux différentes échelles de la chaîne de production chimique : c'est-à-dire bien comprendre comment les phénomènes à une échelle déterminent les propriétés et comportements à l'échelle supérieure et ce, depuis l'échelle moléculaire jusqu'aux échelles du site de production.

Nous verrons aussi que cette approche multiéchelle, l'**approche verte du génie des procédés** qui combine à la fois un attrait des marchés (*market pull*) et une demande d'innovation technologique (*technology push*) est menée avec quatre objectifs principaux qui sont fortement mobilisés sur l'intensification des procédés et sur le génie du couple « produits verts/procédés verts ».

Le but est de produire beaucoup plus et mieux en consommant beaucoup moins, et de produire des molécules plus durables possédant des enjeux environnementaux et économiques avec des technologies et procédés innovants conduisant à une meilleure utilisation des matières premières et de l'énergie.



# GLOBALISATION DES MARCHÉS ET CONSCIENCE SOCIÉTALE

Face à la globalisation des marchés, à l'accélération des partenariats et des demandes d'innovation, **connaître les produits et les procédés qui seront compétitifs dans l'actuelle économie mondialisée** est la première des exigences adressées à la recherche et à l'innovation en génie chimique et plus généralement en génie des procédés. De fait, si au début des années 1970, la durée de demi-vie d'innovation de produit (temps d'accès au marché) était d'environ 10 ans, aujourd'hui une année est souvent considérée comme un temps long, conséquence de la compétition croissante qui règne sur les marchés. En outre, plus de 14 millions de composés chimiques peuvent être synthétisés, 100 000 peuvent être trouvés sur le marché, mais seulement quelques pourcents d'entre eux se trouvent dans la nature et donc la plupart doivent être délibérément conçus, formulés, synthétisés et fabriqués pour répondre au besoin de l'humanité, pour tester une idée ou bien encore pour satisfaire notre soif de connaissance. Ainsi, un grand nombre de demandes du XXI<sup>e</sup> siècle concernent :

- le développement de biomatériaux ;
- la préparation de nanoparticules ;
- le relargage contrôlé de médicaments, les bionanotechnologies ;
- la conversion de la biomasse ;
- l'utilisation des liquides ioniques et systèmes aqueux biphasiques ;
- la dynamique de relaxation des composés moléculaires complexes ;

- la fabrication de microréacteurs polyphasiques pour des réactions sélectives, c'est-à-dire, fluoration.

Toutes ces demandes sont clairement focalisées sur des exigences sociétales, comme :

- la séquestration du CO<sub>2</sub> ;
- la combustion chimique en boucle ;
- le reformage et l'oxydation catalytique partielle du méthane pour produire du gaz de synthèse ;
- la synthèse des biocarburants ou la production d'hydrogène.

La plupart de ces sujets sont répertoriés dans des « feuilles de route » publiées depuis une quinzaine d'années, telles :

- les 12 principes de la chimie verte [Anastas (P.T.), Warner (J.C.) - Green Chemistry : Theory and Practise. - Oxford University Press, New York (1998)] ;
- les 12 principes de l'ingénierie verte [Anastas (P.T.), Zimmermann (J.B.) - Design of green engineering, through the 12 principles. - Environ. Sci. Technol., 37, 5, p. 94A-101A (2003)] ;
- les 12 grands défis pour l'ingénierie énoncés par l'Académie Nationale Américaine d'Ingénierie (NAE USA 2008) ;
- la feuille de route de l'ICChemE 21st Century Chemical Engineering (ICChemE roadmap (UK) 2007) ;
- la feuille de route des 10 domaines de recherche à développer en ingénierie verte pour l'industrie pharmaceutique et la chimie fine (site ACS Green Chemistry institute) ;
- la feuille de route européenne pour l'intensification des procédés pour les quatre secteurs industriels : (a) PETCHEM pour pétrochimie et chimie lourde ; (b) FINEPHARM pour

chimie de spécialités et pharmacie ; (c) INFOOD pour ingrédients nutritionnels et (d) CONFOOD pour consommation d'aliments.

Toutes ces feuilles de route attirent l'attention sur une inquiétude globale planétaire où le génie des procédés devra jouer un rôle crucial : durabilité, santé, sécurité et environnement, énergie, eau, nourriture et boisson, génie des bio systèmes, énergie solaire, fusion nucléaire, etc. Et enfin, ces feuilles de route « militent » pour faire évoluer le génie des procédés **vers un génie des procédés moderne volontairement concerné par le développement durable**. Ainsi les procédés existant et les nouveaux procédés doivent et devront être progressivement adaptés aux principes de la « chimie verte ».

- **La seconde exigence est directement liée à la demande évolutive des marchés** qui conduit à un double défi. Dans les pays en développement où la main-d'œuvre est bon marché, les contraintes locales dans la régulation de la production sont moindres et par suite les coûts de produc-

tion sont faibles et très compétitifs. Les pays industrialisés quant à eux connaissent une croissance rapide dans la demande client pour des produits à propriétés d'usage ciblées et en même temps des contraintes issues du public et des médias portant sur les procédés dans les domaines de la sécurité et de l'environnement, combinées à des outils de réglementation comme l'analyse du cycle de vie du produit « du berceau à la tombe » [voir par exemple la norme européenne pour les produits chimiques *Regulation, Evaluation, Authorization of Chemicals* (REACH)].

Pour répondre à une telle demande sociétale de développement durable (durabilité) et offrir une contribution au combat contre la destruction environnementale et le comportement « non durable » de la production mondiale actuelle où il apparaît que seulement un quart des richesses extraites de la Terre se retrouve sous forme de produits et de services (*figure 1*), la chimie et le génie des procédés sont désormais confrontés à de nouveaux défis portant sur des systèmes complexes à la fois à l'échelle des molécules, à l'échelle des produits et à l'échelle des procédés.

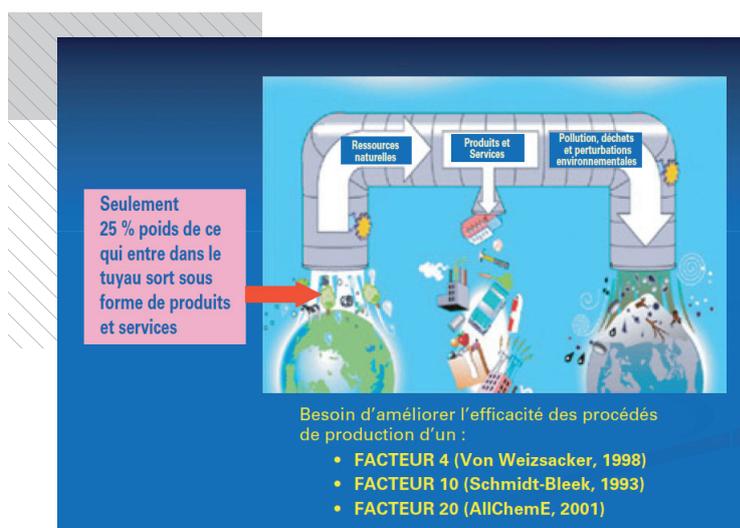


Figure 1 - Comportement non durable de l'humanité (doc. World Research Institute)

# APPROCHE MULTIÉCHELLE DE TEMPS ET D'ESPACE

Le but du génie des procédés est le développement de concepts, de méthodologies et de technologies pour mieux comprendre, concevoir, dessiner et faire fonctionner de façon optimale les procédés de transformations physico-chimiques et biologiques de la matière première et de l'énergie en des produits utiles au consommateur.

Mais, comme nous l'avons souligné précédemment, l'accent mis aujourd'hui sur l'élaboration des propriétés d'usage de certains produits nécessite l'utilisation d'une large variété de technologies incluant notamment le **nouveau rôle des microtechnologies**, c'est-à-dire l'utilisation de micromélanges, de micro-échangeurs de chaleur et de matière, et de réacteurs microstructurés pour l'intensification de certains procédés de production. 60 % de tous les produits vendus par les industries chimiques et connexes sont des solides cristallins, amorphes ou polymériques. Ces matériaux doivent avoir une forme clairement définie pour posséder les qualités d'usage souhaitées. Il en va de même pour les produits pâteux et les émulsions. La production de tous ces produits concerne globalement des matériaux hautement spécialisés, des principes actifs et des produits de chimie de spécialité qui sont en fait beaucoup plus complexes en termes de structure moléculaire et de nano et microstructures que les produits traditionnellement fabriqués par la chimie lourde.

Voilà pourquoi le génie des procédés moderne est concerné par le développement de procédures systématiques (approche systémique) pour la compréhension, la conception et le fonctionnement optimal de tous les processus physico-bio-chimiques complexes qui interviennent aux différentes échelles d'espace et de temps rencontrées dans

ce qui est défini comme la chaîne de production chimique - *chemical supply chain* (figure 2). Cela va des échelles nano (voire pico) et micro pour les processus moléculaires, les usines cellulaires, les clusters, les particules et pour les couplages entre réactions (bio)chimiques et phénomènes de transport et de transferts de matière et de chaleur jusqu'aux échelles méso, macro et méga des unités et du site de la production industrielle du produit, et ce, avec des procédés continus ou en batch, bien contrôlés et non polluants.

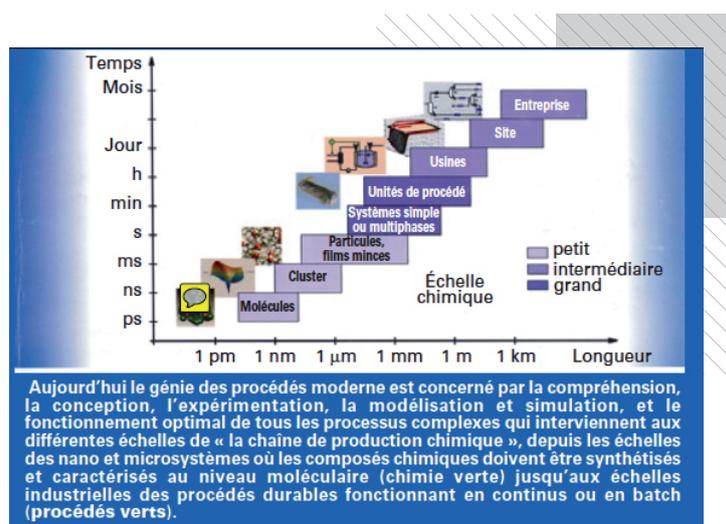


Figure 2 - Multiéchelle de la chaîne de production chimique

Les enjeux sont donc de comprendre et de décrire les relations qui existent entre les événements intervenant aux échelles nano et micro pour mieux convertir les molécules en produits utiles aux échelles du procédé continu ou en discontinu de production industrielle.

Pour répondre à ces enjeux, une nouvelle approche systèmes complexes, dénommée « **Génie du triplet Processus-Produit-Procédé (G3P)** » [Charpentier (J.C.) - The triplet "molecular process-product-process" engineering : The future of chemical engineering ? - Chemical Engineering Science, 57, p. 4667-4690 (2002)] est donc nécessaire. Elle intègre des phénomènes complexes multidisciplinaires, non linéaires et hors-équilibre, se produisant aux différentes échelles de temps et de longueur qui interviennent pour la mise en œuvre du procédé, afin de comprendre comment des processus physico-bio-chimiques et de transfert à une échelle donnée sont reliés à des propriétés et à un comportement à une échelle supérieure. C'est ce qu'on appelle organiser les niveaux de complexité des différentes échelles de temps et de longueur rencontrées et couvertes par cette approche intégrée multiéchelle des procédés.

Ainsi, en plus des deux paradigmes de base et irremplaçables du génie chimique que sont :

- (1) les opérations unitaires (distillation, absorption, extraction, adsorption, séchage, cristallisation, filtration, fluidisation, etc.) ;
- (2) les transferts couplés de chaleur, de matière et de quantité de mouvement et les fondamentaux et outils traditionnels du génie chimique (thermodynamique, catalyse, génie de la séparation, simulation, optimisation et contrôle des procédés, considérations technico-économiques...);
- cette approche multiéchelle G3P, qui peut être considérée comme le **3<sup>e</sup> paradigme du génie des procédés** [Charpentier (J.C.) - Among the trends for a modern

chemical engineering, the 3rd paradigm : The time and length approach as an efficient tool for process intensification and product design and engineering. - Chemical Engineering Research and Design, 88, p. 248-254 (2010)] est donc un atout supplémentaire considérable pour le développement et le succès de cette science de l'ingénieur qu'est le génie des procédés, en termes de concepts et paradigmes, à la fois pour l'intensification des procédés et pour le génie du produit (conception, formulation, fabrication et production des produits ciblés). Un paradigme est considéré comme une approche scientifique de la réalité propre et adaptée au système de pensée d'une communauté scientifique.

Il faut souligner que cette approche intégrée multiéchelle est maintenant réalisable et de plus en plus utilisée grâce aux développements technologiques considérables obtenus dans l'instrumentation scientifique analytique, pour les techniques instrumentales non invasives couplées avec le traitement du signal et de l'image, et aux avancées des technologies informatiques (*clusters* de calcul, supercomputers, cloud computers, *graphic processing units*, parallélisation des codes numériques, etc.) qui permettent le développement et l'application de modèles descriptifs et de simulation, pour la conduite en régime transitoire ou permanent à l'échelle considérée des molécules, de la structure du catalyseur, du site, de l'état de surface et dynamique du fluide local, de la particule de catalyseur, de l'unité de production, de l'usine, ou bien à plusieurs de ces échelles qui interviennent dans la chaîne de production.



# DÉVELOPPEMENT DURABLE

Au carrefour de la chimie et du développement durable, pour répondre aux enjeux précédents de demande de procédés durables qui devront être progressivement adaptés aux principes de la « chimie verte », et en prenant en compte les avancées méthodologiques et technologiques précitées, **quatre objectifs principaux, parallèles et simultanés**, sont mis en jeu et font l'objet de recherches intensives et de développements méthodologiques et technologiques notables pour le génie des procédés moderne.

## CONTRÔLE TOTAL MULTIÉCHELLE DU PROCÉDÉ

Le nano et microfaçonnage sur mesure de matériaux à structure contrôlée permet d'augmenter la sélectivité et la productivité.

Cet aspect nécessite l'**intensification** des opérations et l'utilisation d'outils de conceptions nano et microtechnologiques précises.

Par exemple, en **ingénierie moléculaire**, au lieu d'utiliser des supports poreux en catalyse hétérogène, des matériaux fonctionnels avec des propriétés ciblées sont maintenant conçus et fabriqués. En effet, la maîtrise simultanée de la composition et de la fonctionnalité d'un catalyseur est impérative pour le succès d'un procédé catalytique. Et la possibilité de contrôler sa microstructure et sa composition chimique permet de maîtriser l'activité, la sélectivité et la stabilité du catalyseur. Ainsi, en contrôlant, *via* la synthèse de nanostructures, la dimension des pores ou des cristallites et en manipulant la stœchiométrie et la composition chimique, il existe maintenant la possibilité de fabriquer de nouvelles

structures aux échelles moléculaires et supramoléculaires. On peut mentionner la synthèse contrôlée en milieux aqueux de nanoparticules de métaux (nanosphères, nanobâtes, nanocubes, nanotétrapodes, nanoprismes), nanoparticules qui peuvent servir elles-mêmes de blocs de construction pour la synthèse de matériaux avancés (par analogie avec les atomes ou molécules formant les constituants de base de la matière) et qui trouvent aujourd'hui de nombreuses applications, notamment à cause de leurs nouvelles propriétés de surface/stabilité colloïdale, leur biocompatibilité et leur faible toxicité.

Toujours avec la possibilité qui existe aujourd'hui de développer de nouveaux **matériaux nanostructurés** avec des configurations et morphologies spécifiques, on mentionnera l'utilisation de ces puissants outils de conception pour la préparation de membranes avec une sélectivité et une perméabilité contrôlées beaucoup plus grandes que celles qui existent actuellement. Et l'immobilisation de catalyseurs et de biocatalyseurs au sein même de leurs nanostructures apparaît comme une nouvelle approche intéressante pour la conception des membranes catalytiques avec des applications énergétiques et environnementales. Et de plus l'exemple des membranes caractérisées par des mécanismes de transport hautement sélectifs comme la pérovskite utilisée pour la séparation de l'oxygène de l'air ou le palladium pour la purification de l'hydrogène suggère le recours à la modélisation moléculaire pour identifier de nouvelles structures caractérisées par des sélectivités semblables, mais concernant un plus grand nombre de composés chimiques.

Par ailleurs, au niveau plus élevé de la **microéchelle**, le contrôle des températures et des compositions locales au

moyen d'alimentation et d'échanges de chaleur programmés conduisent à une plus grande sélectivité et une plus grande productivité que dans l'approche classique qui impose des réactions et des processus de transferts à l'échelle du volume global confiné du réacteur. Mais trouver des moyens pour apporter l'énergie au bon endroit afin d'améliorer le procédé durablement en lui fournissant un flux local « informé » d'énergie qui puisse être utilisé de manière intelligente (en utilisant par exemple des champs électriques ou électromagnétiques, des techniques micro-ondes, des transducteurs ultrasoniques, des faisceaux lasers ou des sondes électrochimiques pour promouvoir les transferts ou orienter un mécanisme réactionnel) reste encore souvent un défi et ouvre des perspectives dans un proche avenir.

## INTENSIFICATION DES PROCÉDÉS

L'intensification des procédés passe par la conception de nouvelles technologies et de nouveaux équipements s'appuyant sur des principes scientifiques, sur de nouveaux modes opératoires ou sur de nouvelles méthodes et échelles de production.

D'une façon générale, l'intensification des procédés fait appel à des technologies complexes qui remplacent des équipements et procédés de production de grande dimension, gourmands en énergie, chers et polluants par des dispositifs combinant des opérations multiples dans un même appareillage ou bien par des équipements plus petits, moins coûteux, plus efficaces, plus sécurisés et moins polluants. Ainsi, l'intensification des procédés comporte une composante développement durable très forte avec les diminutions de la consommation des matières premières et d'énergies et de la production de déchets. Elle peut conduire également à une diminution des coûts de production de l'ordre de 30 %.

L'objectif est clairement de **produire beaucoup plus** (et mieux) **en utilisant beaucoup moins**. Cela signifie produire plus et mieux dans de plus petits volumes, avec une meilleure efficacité et une plus grande sélectivité, en utilisant moins d'énergie et de matières premières, moins

de solvants, un plus petit nombre d'équipements et avec des coûts de transport réduits.

Avec l'intensification des procédés, c'est typiquement une approche développement durable que s'est approprié aujourd'hui le génie des procédés moderne.

## GÉNIE DU PRODUIT : ÉLABORATION DES PROPRIÉTÉS D'USAGE ET FABRICATION DU PRODUIT

En réponse à la demande du marché pour des produits sophistiqués, (nano/micro)structurés qui combinent plusieurs fonctions ou propriétés d'usage, les procédés et les technologies de fabrication concernent principalement :

- des **milieux complexes** comme les liquides non-newtoniens, incluant les gels, les polymères hydrosolubles ;
- les colloïdes, les dispersions, les émulsions, les microémulsions et les suspensions, pour lesquels la **rhéologie** et les **phénomènes interfaciaux** jouent un rôle majeur.

Ils concernent également la conception et la fabrication des particules solides et des solides divisés que l'on utilise dans 70 % des industries chimiques et connexes qui requièrent :

- la création et le **contrôle de la distribution des tailles des particules** dans des opérations telles que la cristallisation, la précipitation, la pulvérisation, la génération d'aérosols et de nanoparticules ;
- mais aussi le **contrôle de la morphologie et de la forme finale** des particules dans des opérations de calcination, agglomération, extrusion, compaction et (micro)encapsulation.

Ces technologies concernent également les particules solides qui sont formulées pour accomplir des **opérations intelligentes** comme un relargage contrôlé de composants ou de principes actifs.

Dans ces domaines, les coûts combinés de fabrication et de R&D constituent de 30 à 35 % du coût du produit, partagés approximativement à part égales entre ces deux postes. D'où l'importance des collaborations quotidiennes



entre de nombreuses firmes industrielles et des partenaires universitaires dans des programmes de recherche-développement faisant appel à des programmes portant sur des thèmes de recherches multidisciplinaires et multiéchelles d'espace et de temps. Il faut admettre que cela a conduit à de nombreux progrès méthodologiques effectués ces dernières années dans le domaine de la formulation du produit et du contrôle de son procédé de production :

- Imodélisation et simulation moléculaire pour obtenir la propriété d'usage ;
- Isimulation, modélisation des processus de cinétique chimique et des phénomènes de transport et de transferts ;
- lextrapolation à différentes échelles de la chaîne de production depuis l'échelle de la molécule jusqu'à l'échelle du laboratoire.

Et puisque la ou les propriétés d'usage de produits structurés formulés à l'échelle moléculaire peuvent être altérées par le procédé de production du produit aux échelles du laboratoire et/ou de l'unité industrielle, il est clair que le procédé de production ne peut pas être découplé du procédé de formulation du produit.

Cela souligne encore une fois le besoin de conception simultanée aux échelles du produit et du procédé pour ces produits structurés à valeur d'usage ciblée, et ce, dès la conception à l'échelle moléculaire.

Ainsi pour la fabrication de la propriété d'usage d'un produit, on peut alors parler non seulement de formulation ou de génie du produit, mais plus exactement et explicitement, de **génie des procédés vert concerné** parce qu'il faut intituler le couple **produits verts/procédés verts** afin de produire durablement des molécules aux enjeux économiques et environnementaux. En fait la fabrication de la propriété d'usage du produit relève du génie des procédés moderne « vert » qui est totalement et explicitement concerné par et focalisé sur le couple, produits verts obtenus avec des procédés verts, ce que l'on peut résumer sous le vocable : **génie des procédés vert**.

Mais comment les opérations peuvent-elles être extrapolées de l'échelle du laboratoire à celle des installations ? Peut-on

obtenir durablement le même produit avec ses propriétés conservées ? Quel est le rôle de la conception des équipements dans la détermination des propriétés du produit ? L'ensemble de ces questions ne trouve de réponse que par le biais de la modélisation et de la simulation multiéchelle qui concerne une autre piste de développement de recherche en génie des procédés.

### GÉNIE DU PROCÉDÉ : MODÉLISATION ET SIMULATION INFORMATIQUE

Nous avons insisté précédemment sur la nécessaire approche intégrée multidisciplinaire et multiéchelle pour gérer la complexité des phénomènes rencontrés dans la modélisation du **triplet Processus moléculaire-Produit-Procédé** utilisée pour extrapoler depuis les échelles des nano et microstructures caractérisant les propriétés d'usage des produits jusqu'à la mésoéchelle de l'équipement de production de ces produits. Mais la tâche du génie des procédés est aussi de concevoir et d'implémenter le système complet de production jusqu'aux échelles macro et méga de l'ensemble des unités de production et de leur environnement. Ce système complet comporte à la fois :

- les procédés individuels et l'ensemble des unités nécessaires à la production du produit désiré ;
- et l'intégration de ces procédés individuels dans le site global de production, en termes de matériaux, d'énergie et de services et logistiques qui doivent aussi prendre en compte les demandes du consommateur et plus largement de la société.

Naturellement, il est aujourd'hui totalement irréaliste et utopique de penser qu'avec un seul outil de simulation, on pourrait simuler simultanément tous les phénomènes physico-chimiques, hydrodynamiques et de transfert intervenant à toutes les échelles de temps et d'espace rencontrées dans les unités et le site de production (*figure 3*), comme par exemple concevoir une raffinerie ou un complexe cimentier ou papetier à partir des équations de Schrödinger !

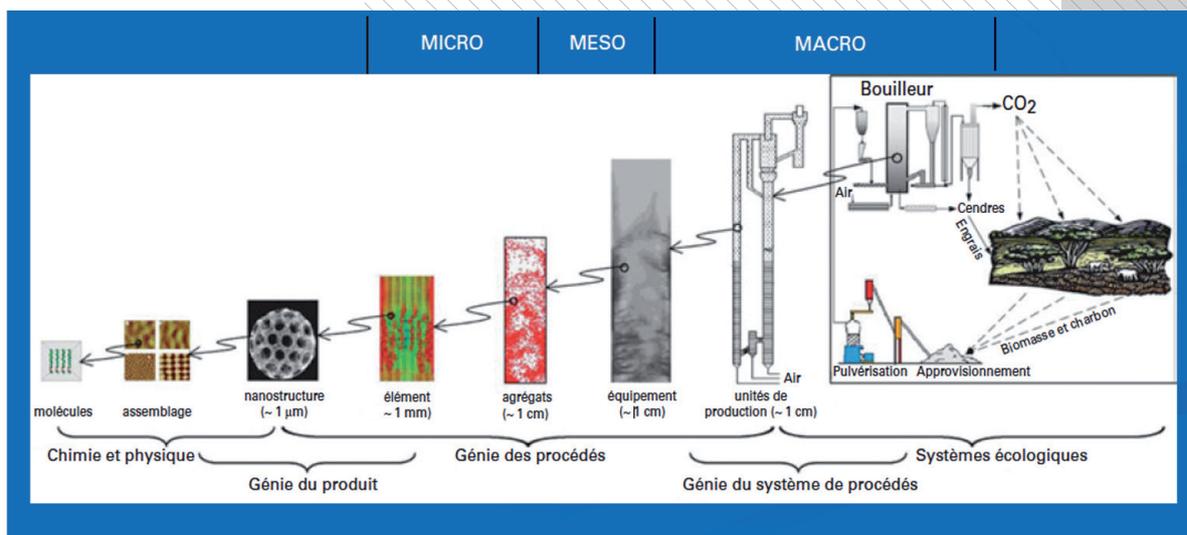


Figure 3 - Échelles de simulation et de modélisation en génie des procédés

Mais c'est un objectif du génie des procédés que d'analyser et de modéliser la complexité des phénomènes à l'échelle considérée pour fournir des résultats nécessaires à la compréhension et à la modélisation des phénomènes intervenant à une échelle supérieure dans l'équipement ou le réacteur considéré pour la production du produit. En partant de l'échelle moléculaire, il est nécessaire de trouver des méthodes de modélisation et des outils de simulation pour l'intégration fonctionnelle des différentes étapes et échelles du procédé individuel, puis pour l'intégration des procédés individuels de production dans le complexe industriel. Cela nécessite des modélisations et des simulations informatiques capables :

- de concevoir des étapes individuelles ;
- de structurer l'ensemble du procédé individuel de production de produit ;
- de placer ce procédé individuel dans l'ensemble du site de production industrielle.

On peut regrouper et classer l'ensemble de ces modèles et simulations aux différentes échelles d'espace et de temps suivant trois groupes. Ils concernent les phénomènes qui interviennent :

- aux échelles moléculaires ;
- aux échelles à l'intérieur du réacteur ;
- aux échelles concernées par la simulation, l'automatique et le contrôle du procédé de production.

Il est évident que chacun de ces groupes peut comporter une approche multiéchelle, par exemple molécule/site catalytique pour les simulations aux échelles moléculaires ou bien site catalytique/écoulement de fluide/transferts de matière ou de chaleur pour les simulations aux différentes échelles concernées dans un réacteur. De plus, il est bien évident qu'un des buts de la modélisation multiéchelle est de tenter de connecter les codes de simulation de ces différents groupes pour pouvoir mettre en œuvre l'approche système intégrée du génie du triplet (Processus moléculaire/Produit/Procédé).

# POUR EN SAVOIR PLUS

- **Chimie verte.** - Retrouvez l'intégralité de l'offre <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/procedes-chimie-bio-agro-th2/chimie-verte-ti142/>
- **Jean-Claude CHARPENTIER.** - *Génie des procédés, développement durable et innovation - Enjeux et perspectives* [J500], (sept. 2013), <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/procedes-chimie-bio-agro-th2/industrialisation-des-procedes-defis-et-nouvelles-approches-42602210/genie-des-procedes-developpement-durable-et-innovation-j500/>
- **Sylvain CAILLOL.** - *L'écoconception : un outil d'innovation pour une chimie durable* [J4920], (mai 2011), <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/procedes-chimie-bio-agro-th2/industrialisation-des-procedes-defis-et-nouvelles-approches-42602210/l-ecoconception-un-outil-d-innovation-pour-une-chimie-durable-j4920/>
- **Karima BENAÏSSI.** - *Le CO<sub>2</sub> supercritique appliqué à l'extraction végétale*, [CHV4015], (mai 2013), <http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/procedes-chimie-bio-agro-th2/industrialisation-des-procedes-defis-et-nouvelles-approches-42602210/l-ecoconception-un-outil-d-innovation-pour-une-chimie-durable-j4920/>

