

# Société de Chimie Industrielle

- 92 Journée sur le «Contrôle automatique industriel, facteur de qualité», Lyon-Villeurbanne.
- 92 Journée sur les analyses dans l'environnement air et eau - Analyse par chromatographie et autres méthodes, Paris.
- 92 In memoriam : Jean Gall.
- 93 Fédération Européenne du Génie Chimique.  
Rapport du Prof. H. Brusset sur le Congrès «Contribution des calculateurs électroniques au développement du génie chimique et de la chimie industrielle, Paris.
- 95 Fédération Européenne de la Corrosion.  
Semaine de la corrosion du Cebelcor sur la prévention de la corrosion, Bruxelles.
- 97 Bulletin d'inscription pour la 5<sup>e</sup> Conférence européenne des plastiques et des caoutchoucs, Paris.

● Recueil des 37 communications présentées en conférences-affichage (en anglais),

### **3<sup>e</sup> Congrès international de l'électrostatique,**

20-22 avril 1977, Grenoble,

Prix du recueil : 200 F.

● Recueils des sections et colloques,

### **XI<sup>e</sup> Conférence internationale des Arts Chimiques,**

6-9 décembre 1977, Paris. 7 recueils (les recueils 5 et 6 sont épuisés) :

Section 1 à 7 : Le génie chimique et le traitement des déchets. (1 : Études générales, économie et statistiques. 2 : Traitement des déchets minéraux et miniers. 3 : Boues et déchets urbains et industriels. 4 : Déchets organiques et végétaux. 5 : Déchets d'hydrocarbures et de solvants. 6 : Traitement et récupération des déchets de plastiques. 7 : Traitement de résidus toxiques).

Prix de chaque recueil : 80 F.

● Recueils des communications (en anglais) des 6 sections. A. Recherche fondamentale et appliquée, B. Séparation et mélanges, C. Réacteurs et ateliers, D. Contrôle et automatisation, E. Exploitation des données techniques et aspects humains, F. Problèmes numériques et optimisation,

### **Congrès international sur la « Contribution des calculateurs électroniques au développement du génie chimique et de la chimie industrielle »**

7 - 10 mars 1978

Prix de chaque recueil : 100 F.

● Recueil des conférences,

### **Colloque sur l'analyse des gaz en continu et progrès des capteurs,**

19-21 avril 1978, St-Etienne.

Prix du recueil : 100 F.

● Monographies de la Société de Chimie Industrielle,

### **Le noir d'acétylène. Fabrication. Propriétés. Applications,** par Yvan Schwob,

Prix de la monographie : 150 F.

S'adresser à la Société de Chimie Industrielle,  
28, rue Saint-Dominique,  
75007 Paris.

Tél. 555.69.46

### Rappel

### **5<sup>e</sup> Conférence européenne des plastiques et des caoutchoucs**

12 - 15 juin 1978, Paris (Centre International de Paris).

(*L'actualité chimique*, avril 1978, p. 100).

## Communiqués

### Journée sur le « Contrôle automatique industriel, facteur de qualité »

21 septembre 1978, Lyon-Villeurbanne.

Le Groupe de Chimie Analytique de la Société de Chimie Industrielle organise, dans le cadre de la manifestation INSA-CAST, une journée sur le « Contrôle automatique industriel, facteur de qualité », qui se déroulera le 21 septembre 1978 à l'INSA, Lyon-Villeurbanne.

Le programme complet ainsi qu'un bulletin d'inscription figurent dans le numéro de juin de *L'actualité chimique*.

L'après-midi, une table ronde, présidée par M.J. Normand, Rhône-Poulenc, Centre de recherches de Décines, sera consacrée aux thèmes suivants :

- Mise au point d'un automatisme en analyse industrielle.
- Répercussion de l'automatisation sur la qualité (meilleure

utilisation des matières premières, de l'énergie; qualité du produit fini; protection de l'environnement; hygiène et salubrité aux postes de travail).

A l'occasion de cette Journée sera remis le Prix de chimie analytique 1978 de la Société de Chimie Industrielle au lauréat choisi par le jury du Groupe. Le récipiendaire fera ensuite un exposé de ses travaux.

Renseignements : Société de Chimie Industrielle, 28 rue Saint-Dominique, 75007 Paris. Tél. 555.69.46, et M.D. Coutagne, R.-P., Centre de Décines, 24, av. Jean Jaurès, 69150 Décines. Tél. (78) 49.38.10, P. 307.

Prix de la Journée : 120 F. (inscription, déjeuner et recueil des textes).

### Journée sur les analyses dans « L'environnement air et eau - Analyses par chromatographie et autres méthodes »

Début 1979, Paris.

Le Groupe de Chimie Analytique de la Société de Chimie Industrielle organisera au début 1979, en collaboration avec le GAMS (Groupement pour l'Avancement des Méthodes Spectroscopiques et physico-chimiques d'analyse, une journée consacrée aux analyses dans l'environnement air et eau.

Les personnes qui désirent présenter une communication peuvent

prévenir dès maintenant de leur intention le secrétariat de la Société de Chimie Industrielle.

Des renseignements complémentaires seront publiés ultérieurement.

Secrétariat de la Société de Chimie Industrielle : 28 rue Saint-Dominique, 75007 Paris. Tél. 555.69.46.

---

## In memoriam

### Jean Gall

Monsieur Jean Gall, Président d'honneur de l'Union des Industries Chimiques, est décédé le 17 avril dernier dans sa 80<sup>e</sup> année.

Le Président Gall avait fait toute sa carrière industrielle à la Société des Produits Azotés. La fabrication de la cyanamide l'avait amené à produire le carbure de calcium nécessaire, puis à développer un certain nombre de dérivés de l'acétylène auxquels le nom de sa Société et celui de son animateur restent associés.

Il fut, pendant de nombreuses années, le Président du C.P.I., cette association internationale qui groupait les professions du carbure, des gaz dissous et de la soudure autogène. La fusion de la Société des Produits Azotés avec Ugine et Kuhlmann en 1962 avait conduit Jean Gall au Conseil des Produits Chimiques Ugine Kuhlmann en qualité de Vice-Président. Il fut le premier

directeur général de la GESA, Société Générale des Engrais S.A. qui, regroupant les fabrications des groupes PUK et Rhône-Poulenc, devenait le premier producteur français d'engrais.

Appelé par la confiance unanime de l'industrie chimique à la présidence de l'Union des Industries Chimiques, il occupa ces hautes fonctions de 1966 à 1974, époque qui vit s'accomplir une transformation capitale de l'industrie chimique française.

Le Président Jean Gall, administrateur de la Société de Chimie Industrielle, a donné maintes preuves de son attachement à cette Société dont son père, Henry Gall, avait été l'un des fondateurs et premiers présidents. Celle-ci lui en garde une fidèle reconnaissance et adresse à Madame Gall et à ses enfants ses bien vives condoléances.

# Fédération Européenne du Génie Chimique

## Contribution des calculateurs électroniques au développement du génie chimique et de la chimie industrielle \*

par le Professeur Henry Brusset  
(Délégué français au Comité scientifique de la Fédération Européenne du Génie Chimique).

Le groupe de travail de la Fédération Européenne du Génie Chimique sur les « Programmes de Routine et l'Emploi des Calculateurs Électroniques en Génie Chimique » en association avec la Société de Chimie Industrielle a organisé un congrès sur ce vaste sujet avec la collaboration des Sociétés-Membres de la Fédération Européenne du Génie Chimique, de l'American Institute of Chemical Engineers et de la Society of Chemical Engineers of Japan.

Ce congrès était composé de six sections qui ont constitué chacune un colloque sur un thème particulier. Les participants ont ainsi pu choisir librement les sujets qui suscitaient leur intérêt dans le vaste ensemble des problèmes où les calculateurs électroniques apportent une importante contribution au développement de l'industrie chimique.

Deux conférences magistrales et deux tables rondes ont complété les communications présentées.

La recherche tant fondamentale qu'appliquée en chimie industrielle bénéficie de l'informatique.

La thermodynamique des équilibres appliquée aux mélanges liquides comme aux réactions chimiques est un champ privilégié d'emploi du calcul électronique depuis que les calculateurs sont entrés dans la pratique, mais il reste encore beaucoup de progrès à faire sur l'état liquide des mélanges.

En cinétique des systèmes complexes, les relations exprimant les vitesses de réactions successives et de réactions simultanées reçoivent une solution numérique qui permet d'utiliser des modélisations de plus en plus complexes et de réussir des simulations en accord avec des ensembles étendus de données expérimentales.

Dans le cas de telles réactions, les calculateurs numériques constituent désormais un outil indispensable de travail et ouvrent un champ nouveau de progrès dans un domaine où la chimie était jusqu'ici fondamentalement qualitative. La capacité élevée des calculateurs actuels permet l'emploi de modèles mathématiques très élaborés et des simulations qui fournissent des résultats ne différant que très faiblement des résultats expérimentaux dans un grand nombre de cas.

Les transferts entre milieux physiques sont traduits par des modèles où les dérivées partielles appellent l'emploi du calcul électronique mais la turbulence des milieux polyphasés reste encore souvent trop complexe pour les connaissances acquises.

Compte tenu des données disponibles en cinétique chimique ou physique de même que des méthodes préparatives, la planification de cascades de synthèses utilise désormais avec profit l'aide des ordinateurs et permet de prévoir les meilleures voies possibles pour obtenir des molécules de structure compliquée dont l'usage se développe en particulier pour la préparation d'efficaces médicaments.

Enfin, la recherche des structures des molécules de même que des solides bénéficie systématiquement de tout le progrès acquis dans le domaine du traitement du signal et dû pour une bonne partie à l'apport du calcul numérique électronique. Ce progrès

de la physico-chimie du solide a permis la microélectronique moderne qui, par voie de retour, continue à faire progresser le matériel informatique. Dans ce domaine encore de grands progrès ont été réalisés au cours des dernières années.

Les mélanges et les séparations sont l'objet de techniques dont l'emploi est fondamentalement lié au fonctionnement de tout réacteur chimique dans un atelier.

Malgré sa consommation d'énergie, la distillation reste une méthode de choix d'un emploi très général et le calcul des colonnes comme celui de leur conduite optimisée continue à progresser vers une meilleure efficacité, une plus grande économie et une plus grande pureté des produits.

Les calculs de distillation ont fait école et les séparations les plus diverses bénéficient elles aussi de l'apport des calculateurs. Ceci est particulièrement utile lorsque les cascades de fractionnement comportent de très nombreux étages.

L'économie des séparations difficiles comme le sont les séparations isotopiques peut être ainsi améliorée et optimisée.

Une table ronde a permis de faire en commun le point sur une telle opération de base de la chimie industrielle.

Malgré tous les bons résultats déjà obtenus dans la rédaction de programmes relatifs à la distillation, il apparaît que de vastes champs nouveaux restent ouverts à la recherche.

Il en est ainsi pour des algorithmes plus performants ne nécessitant que des matériels répandus de calcul et conduisant à de bonnes convergences, c'est également le cas de la modélisation des séparations azéotropiques ou associées à des réactions chimiques. Il y a encore lieu de développer les méthodes de prédiction de l'efficacité des équipements et tout particulièrement des plateaux. Des logiciels rendant plus facile la communication entre l'opérateur et la machine sont l'objet de progrès qui méritent d'être poursuivis.

Le traitement par ordinateur des mélanges n'est encore pas l'objet d'applications aussi nombreuses et développées que celui des séparations.

La réaction chimique reste toujours l'opération chimique par excellence et le réacteur constitue l'unité centrale du génie chimique.

Les simulations que permettent les calculateurs conduisent à un perfectionnement et à une optimisation des réacteurs, de même qu'à une marche plus efficace. Elles permettent aussi une économie dans l'expérimentation et apportent un facteur important de progrès dans les transferts d'échelle qui constituent encore une coûteuse étape dans l'industrialisation d'un procédé.

Le réacteur n'intervient dans l'atelier qu'en association avec d'autres unités tant en aval qu'en amont et l'optimisation de cet ensemble est de plus en plus efficacement aidé par l'emploi des ordinateurs selon les méthodes du flow sheeting, ce qui a été longuement analysé et étudié dans ce congrès.

La simulation de différentes configurations d'atelier tant en régime stationnaire que dynamique permet la comparaison de projets divers et l'évaluation des investissements de même que des coûts d'exploitation avant que la décision finale de réalisation ne soit prise.

Le contrôle et la commande des unités et ateliers chimiques jouent un rôle essentiel dans une industrie qui utilise relativement peu de main d'œuvre et qui nécessite un taux élevé de surveillance. Malgré les avantages bien établis qu'apporte le contrôle par calculateurs dans l'établissement des bilans et dans l'amélioration des connaissances de la marche des ateliers et malgré aussi les possibilités d'optimisation de la conduite des fabrications qui peuvent être utilisées grâce à l'emploi des calculateurs,

\* Le Professeur Henry Brusset, Président du Comité scientifique du Congrès international sur "La contribution des calculateurs électroniques au développement du génie chimique et de la chimie industrielle", qui s'est tenu à Paris, du 7 au 10 mars 1978, a bien voulu nous faire la synthèse du rapport qu'il a présenté lors de ce congrès.

*l'usage d'ordinateur* en ligne dans des ateliers ne se développe que lentement. Il y a là un problème dont la solution n'avance que lentement et qui mérite d'être revu. Les *microprocesseurs* et *microcalculateurs* par leurs caractéristiques techniques techniques, leurs prix et leur aptitude à un emploi décentralisé introduisent de nouveaux paramètres dans la recherche du développement en contrôle-commande et apportent dans ce domaine une ouverture qui ne se présentait pas encore il y a quelques années. Actuellement, l'automatisation des contrôles en laboratoire et des unités pilotes accroît la précision des mesures et étend considérablement la quantité et la qualité des informations susceptibles d'être acquises en vue d'aider la connaissance et la compréhension des procédés. Le contrôle accroît la *qualité des produits* obtenus, ce qui facilite l'emploi de nombreux produits et ouvre la voie à de *nouveaux débouchés*. Le développement du contrôle est aussi un efficace facteur des économies d'énergie et des matières premières.

Depuis le précédent congrès tenu il y a cinq ans à Paris, l'économie mondiale a profondément évolué et sa transformation continue à influencer le redéploiement qui s'impose à l'industrie chimique de nombreux pays.

Cette grave mutation économique que subissent d'importants systèmes industriels domine de nombreux développements et comportements humains, aussi les problèmes d'orientation et de direction des productions chimiques, d'obtention des matières premières et de distribution des matériaux préparés doivent bénéficier des facteurs les plus favorables à l'élaboration de solutions optimales. La recherche opérationnelle, les banques de données, les aides à la décision, l'analyse des risques ont déjà trouvé pour de nombreux problèmes un outil de qualité dans les calculateurs électroniques. Les changements graves et souvent nettement irréversibles de l'économie des productions chimiques doivent également profiter de ce même outil. Un colloque a été réservé aux études économiques et à leurs aspects humains.

La formation et l'adaptation du personnel aux fabrications et à leur conduite bénéficie de plus en plus de la qualité et de l'assistance apportée par les ordinateurs.

L'extrême limitation de la *rentabilité des logiciels* a profondément influencé les transferts dans ce domaine et une mise au point sur les règles régissant ces transferts de logiciels a précisé utilement la situation actuelle et ses perspectives d'évolution.

Le développement des banques de données met maintenant à la disposition de l'ingénieur chimiste des ensembles facilement disponibles et utilisables de données de haute qualité.

L'analyse des *risques* bénéficie largement des possibilités offertes par l'emploi des calculateurs, enfin l'enseignement assisté par ordinateur se développe tant pour la formation du personnel que pour l'enseignement de base des étudiants s'orientant vers le génie chimique et la chimie industrielle.

Un sixième colloque a été consacré aux problèmes numériques et aux méthodes d'optimisation comme il est logique de le faire dans un congrès ayant pour thèmes l'apport du calcul numérique au développement de l'industrie chimique.

Un important centre d'intérêt est constitué par l'optimisation des systèmes chimiques complexes. Les modèles réalisés sont constitués de fonctions de plusieurs variables, soumises à des contraintes et dépendant de paramètres déterminés par expérimentation. Il y a à tenir compte de ce que les déterminations expérimentales contiennent une erreur et qu'également les méthodes numériques utilisées ne fournissent qu'un résultat approché car les méthodes itératives employées sont arrêtées sur des critères arbitraires, d'où l'absolue nécessité d'évaluer la précision des résultats fournis par les calculateurs.

Il en résulte que des domaines importants de cet emploi du calcul électronique sont constitués par les méthodologies de choix des modèles mathématiques, les méthodes effectives et spécifiques d'optimisation des systèmes chimiques, les méthodes de

caractérisation de la validité des résultats expérimentaux ainsi que celles d'évaluation de la précision des résultats fournis par les calculateurs.

Les calculateurs hybrides continuent à être bien adaptés à la simulation de certains types de processus chimiques complexes.

En faisant le point sur l'état actuel de cet apport du calcul électronique, on ne peut manquer de mesurer le chemin parcouru en une douzaine d'années dans le domaine de l'aide apportée à l'industrie chimique et parachimique dans la connaissance des secteurs d'efficacité industrielle du calcul électronique.

Une enquête menée en 1965 montrait que des mises au point de programmes de calcul étaient entreprises dans de nombreuses sociétés chimiques qui étaient très réticentes à *échanger* et à publier leurs travaux.

Les communications qui ont été réalisées au cours de ce congrès montrent jusqu'à quelles limites se sont déplacées les contraintes de secret et les échanges d'information.

Durant les dernières années, les préoccupations créées par la pollution entraînée par les fabrications industrielles sont devenues plus vives et ont conduit à un nouvel examen des *rejets* provenant des industries chimiques donc de l'optimisation des productions. Mais surtout, au cours des cinq dernières années, l'industrie chimique a été soumise à la mutation économique irréversible qui affecte le monde entier et qui entraîne fatalement une évolution des situations humaines.

L'accroissement mondial des consommations et les transformations d'accès aux *matières premières riches* posent au premier plan le problème de l'emploi des matières délaissées et des économies de matières premières ainsi que d'énergie. L'amélioration des transferts de matière et d'énergie dans les opérations chimiques de même que l'optimisation économique des productions passent en partie par un développement de l'emploi des calculateurs.

L'adaptation de l'accroissement des besoins à l'augmentation et à la diversification des produits élaborés se révèle un très difficile problème à la résolution auquel l'informatique peut apporter une *importante contribution* encore trop *insuffisamment utilisée*.

A cette profonde transformation des conditions économiques de développement de l'industrie chimique s'associent les perfectionnements techniques qu'apportent l'informatique et l'automatique grâce aux spectaculaires progrès de la microélectronique avec ses réalisations de *microprocesseurs*, de microcalculateurs, d'automatismes perfectionnés et avec l'extension des capacités des ordinateurs et des possibilités de la périinformatique. Le développement des réseaux d'interconnexion entre éléments de mémoire et de calcul, entre calculateurs et entre centres informatiques ouvre de nouvelles voies qui doivent conduire à examiner de nouveaux aspects des problèmes fondamentaux.

De nouveaux symposiums en cours d'organisation dès maintenant prolongeront aussi l'examen des problèmes que le développement de l'emploi des calculateurs contribue à résoudre pour le meilleur profit des industries chimiques et parachimiques et permettront de nouvelles études en avril 1979 à Montreux (Suisse), puis en septembre 1980 à Héviz (Hongrie).

Ainsi se trouve confirmée la place importante que l'informatique et l'emploi des calculateurs électroniques ont pris et vont continuer à développer avec le progrès de la préparation et de l'usage des nouveaux produits de synthèse.

Ce congrès a réuni près de 300 participants venus de plus de vingt nations.

# Fédération Européenne de la Corrosion

## Semaine de la corrosion du Cebelcor sur la prévention de la corrosion

26 – 29 juin 1978, Université Libre de Bruxelles

Le Centre Belge d'Étude de la Corrosion Cebelcor organise, du 26 au 29 juin 1978 à l'Université Libre de Bruxelles, une Semaine de la Corrosion consacrée à la prévention de la corrosion.

Cette réunion sera orientée sur l'éducation et l'information ; chaque journée sera partagée entre des cours, des conférences, des démonstrations en laboratoires et des séminaires. Les sujets qui seront traités sont : introduction à la théorie de la corrosion, analyse de problèmes de corrosion spécifiques, choix des matériaux, influence des conditions d'exploitation des installations, contrôle de la corrosion, prévention par protection cathodique, protection anodique, passivation, inhibiteurs, revêtements organiques, prévention de la corrosion des automobiles.

Le but de cette réunion est de fournir au personnel scientifique et technique des entreprises industrielles les éléments pour aborder de manière rationnelle la recherche de solutions aux problèmes de corrosion. Une large place est prévue, au cours de séminaires, pour une discussion approfondie entre les participants, les conférenciers et les animateurs des démonstrations et des séminaires.

Le programme détaillé et tous renseignements complémentaires peuvent être obtenus au Cebelcor, avenue Paul Héger, Grille 2, B-1050 Bruxelles, tél. (02) 649.63.96.

L'inscription est gratuite pour les membres du Cebelcor ; les frais d'inscription sont de 4 000 FB dans les autres cas.

## Sommaire de la revue *Analisis*

Vol. 6, n° 3, mars 1978

*Spectrométrie d'émission à l'aide d'un générateur inductif de plasma*, par J. Robin.

Caractéristiques générales et propriétés physiques du PIHF (plasma induit par haute fréquence) en tant que source d'émission pour l'analyse spectrochimique.

*Étude par infrarouge de la déshydratation et de l'hydratation de silices pour chromatographie*, par P.C. Versaud, Z. El Rassi, M. Porthault.

Après la description du dispositif expérimental utilisé, sont examinés successivement la déshydratation sous vide, l'échange isotopique et la réhydratation d'une silice aérosil et d'une silice chromatographique.

*Application de la lyophilisation à la préconcentration analytique des pesticides organothiophosphorés dans les eaux. I. Influence de la composition minérale de l'eau*, par H. Bargnoux, D. Pépin, j.-L. Chabard, F. Vedrine, J. Petit, J.-A. Berger.

Influence des constituants minéraux et plus particulièrement des bicarbonates sur le comportement des pesticides pendant la lyophilisation. Un traitement préalable est proposé, consistant en une acidification initiale des échantillons.

*Dosage du trioxyde de soufre en présence de dioxyde de soufre dans un mélange de gaz de combustion*, par F. Jorand, J. Chamboux, V. Viostat.

Ce dosage a été mis au point pour de faibles quantités.  $\text{SO}_3$  est mis en solution sous la forme d'ions  $\text{SO}_4^{2-}$  dans un mélange eau-

alcool isopropylique-acétone et les ions sulfates sont dosés par conductimétrie par  $\text{BaCl}_2$ .

*Utilisation de la spectroscopie d'électrons Auger pour l'analyse chimique des surfaces créées lors du frottement*, par J.M. Martin, H. Montes, J.M. Georges, H. Chermette.

Étude de l'usure d'un couple de frottement : acier à roulement – fonte grise lamellaire, lorsqu'il est lubrifié par une solution paraffinique de di-n-butyl dithiophosphate de zinc. Tentative de caractérisation du film créé par le frottement en le comparant à celui réalisé lors de l'adsorption des molécules d'additif sur les surfaces.

*Identification systématique de quelques matières plastiques par thermogravimétrie*, par J. Pastor, A.-M. Pauli, C. Arfi.

Présentation d'une méthode systématique d'identification des matières plastiques basée sur l'étude des thermogrammes obtenus avec une montée en température de  $150^\circ\text{C}/\text{h}$ . Déduction de ceux-ci de quatre points singuliers par substance analysée (début de décomposition, 50 % de perte totale de poids, fin de partie très ascendante du thermogramme et fin de décomposition, outre l'existence ou non d'un résidu en fin d'opération).

*Dosage par colorimétrie automatique des nitrates après réduction par l'alliage de Devarda*, par R. Oliver.

L'auteur montre que la réduction des nitrates en milieu acide est possible, permettant ainsi le dosage colorimétrique de l'ion ammonium et la réalisation de cent analyses par jour par le même opérateur. Les applications agronomiques de la technique sont nombreuses dans des domaines où la variabilité des échantillons rend nécessaire la multiplication des analyses.