Science@ifpen
N° 44 - Mars 2021



Rédigé le 24 mars 2021

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



À IFP School, les activités d'enseignement et de recherche s'enrichissent mutuellement. L'École présente cependant une singularité liée à sa nature d'école de spécialisation : elle est ouverte sur le monde et centrée sur les enjeux professionnels. De ce fait, elle accueille des publics divers et internationaux (étudiants, professeurs, experts, représentants industriels, chercheurs) qui sont tous passionnés par les mêmes enjeux industriels et sociétaux. En offrant l'opportunité d'interactions originales et étroites entre le monde académique et le monde industriel, l'École constitue un terreau fertile et propice au développement d'idées nouvelles.

Ce numéro de Science@ifpen présente la diversité des sujets abordés à l'École, essentiellement dans le cadre des chaires d'enseignement et de recherche. Il met en évidence le dynamisme et la pluralité de ses activités de recherche qui couvrent un large spectre de domaines scientifiques. Il illustre ainsi

que l’École n’est pas seulement un lieu où le savoir est transmis, mais où il est aussi produit, au service d’une ambition commune : dispenser un enseignement d’excellence, pertinent et adapté aux enjeux d’aujourd’hui et de demain.

Bonne lecture,

Christine Travers
Directrice d’IFP School

LES BRÈVES

La lutte contre le réchauffement climatique s'appuie sur la réduction des émissions anthropogéniques de gaz à effet de serre, principalement le dioxyde de carbone et le méthane. La problématique est mondiale et les actions à entreprendre s'inscrivent dans une approche systémique, avec des effets d'échelle difficiles à appréhender. Cependant, **l'accord de Paris traduit la détermination des nations à corriger la trajectoire actuelle tout en respectant les aspirations légitimes des pays émergents à augmenter leur niveau de vie.**

Au-delà de la réduction des émissions à la source, **un levier pour limiter l'impact climatique consiste à extraire le CO_2 dans l'atmosphère** (i.e. émissions négatives), à l'aide de solutions qui soient respectueuses de l'environnement et de la biodiversité, déployables et acceptées par nos sociétés. **Les principales difficultés relèvent de la complexité et de l'interdépendance des phénomènes à considérer**, impliquant des compétences et des outils dans de nombreux domaines, tels que l'énergie, l'affectation des sols ou l'exploitation des forêts, ainsi que les sciences humaines. Si ces compétences existent bel et bien, leur déficit d'interaction pourrait conduire à de mauvaises solutions.

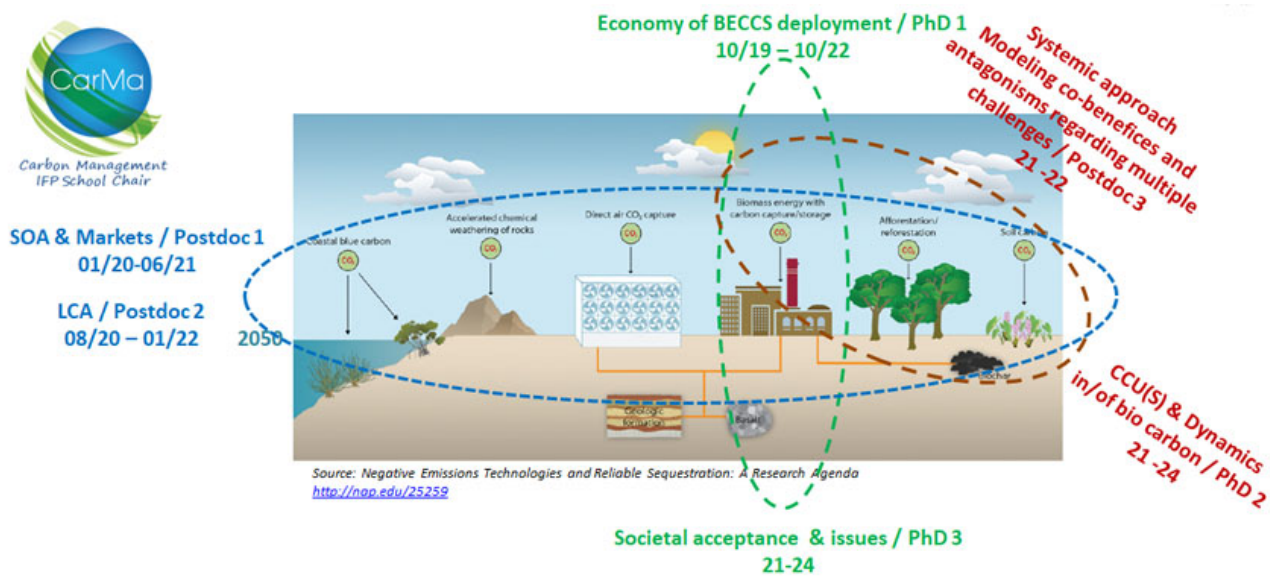
L'ambition de CarMa[1], chaire d'enseignement et de recherche bénéficiant du mécénat de Total, **est d'explorer et d'analyser le champ des émissions négatives de CO_2**, de manière très large, **afin d'identifier quelles voies seraient déployables à l'horizon 2050**. Incluse dans **une démarche de développement durable**, l'approche retenue se focalise sur **trois solutions qui pourraient venir accroître les capacités de piégeage du CO_2** : le captage direct du CO_2 dans l'atmosphère (DACCS), mais aussi le piégeage dans les sols et l'exploitation énergétique de la biomasse couplée au captage et au stockage, voire à l'utilisation, du CO_2 (BECCS).

Ces sujets y sont d'ores et déjà abordés sous les aspects réglementaires, économiques et « Analyse du cycle de vie (ACV) du carbone », **au travers de deux post-doctorats et d'un travail de thèse**. Trois autres jeunes chercheurs seront recrutés en 2021 sur les aspects sociétaux du déploiement des BECCS et des antagonismes et co-bénéfices de l'allocation des sols dans le contexte de l'utilisation de la biomasse à des fins énergétiques. Traités pour certains en partenariat , les sujets de recherche des deux premières années s'inscrivent dans des périmètres illustrés sur la figure.

Les tout premiers résultats, en cours de publication[1] [3], **présentent l'analyse économique d'un cas concret** suédois de collecte, transport et utilisation de la biomasse, assortis du captage, du transport et du stockage du CO_2 produit par la combustion de cette dernière. Dans cette analyse, les concepts de la théorie des jeux coopératifs sont mobilisés afin d'identifier les conditions de coopération entre différents émetteurs connectés à une infrastructure commune, prérequis jugé indispensable pour le déploiement à grande échelle de cette combinaison de technologies.

Dans une optique de sensibilisation du plus grand nombre à cet enjeu crucial du XXIe siècle, **un site web** a été **mis en place afin de favoriser la dissémination des résultats de la chaire**. Le sujet « BECCS » a aussi été intégré à l'**édition 2020 du mooc « *Energy Transition* » proposée par IFP School.**

Cliquer sur l'image pour l'agrandir



Chaire CarMa : périmètres de recherche (années 1 et 2) concernant des approches d'émissions négatives de CO2.

1- CarMa : « Carbon Management and negative emissions technologies towards a low carbon future », créée en juillet 2019 en association avec la Fondation Tuck.
2- Par exemple avec le CNRS, l'université de Pau et des Pays de l'Adour ou l'INRAE
3- L'article en cours de soumission est accessible sur City Research Online et dans Les Cahiers de l'économie, édités par IFPEN - IFP School (n° 135 – Août 2020).

---

[1] E. Jagu et O. Massol. ***Building infrastructures for Fossil- and Bio-energy with Carbon Capture and Storage: insights from a cooperative game-theoretic perspective****, 2020, submitted to Environmental and Resource Economics .*
>> https://openaccess.city.ac.uk/id/eprint/25034/

Contact scientifique : Jean-Pierre Deflandre

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

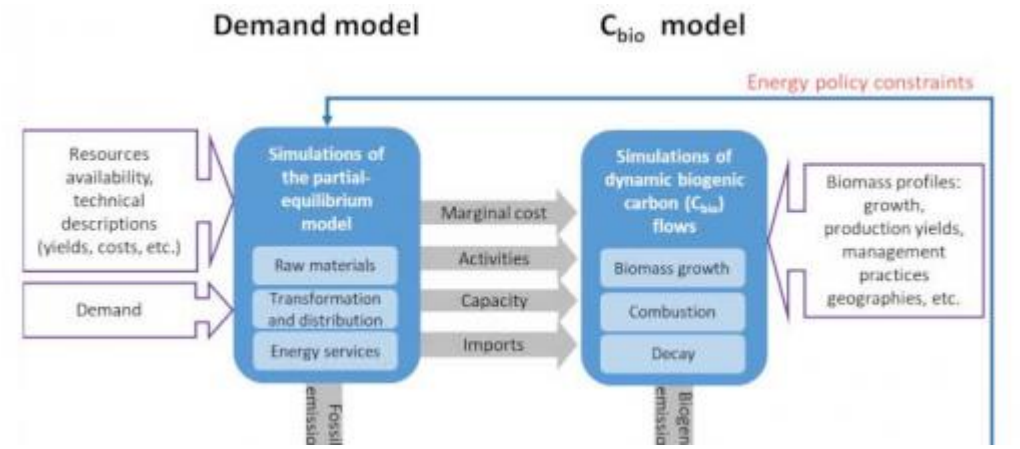
VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Formation et carrières

Actualités juin 2020

Lancement du site Web de la chaire CarMa



sation du CO2

Recherche fondamentale

Actualités avril 2020

Des modélisations dynamiques pour aider à (vraiment) atteindre la neutralité carbone

Climat, environnement et économie circulaire | Surveillance environnementale | Analyse de cycle de vie (ACV)

Économie | Évaluation de l'impact environnemental & ACV



Enjeux et prospective

Regards économiques

décembre 2019

Captage-Stockage-Valorisation du CO2 : un levier pour décarboner l'industrie - La synthèse

Climat, environnement et économie circulaire

Captage, stockage et valorisation du CO2

Chaire CarMa : des émissions de CO2 négatives à l’horizon 2050

Depuis 2016, IFP School collabore avec Mines ParisTech, Toulouse School of Economics et l'université Paris Dauphine-PSL dans le cadre d'une initiative scientifique inédite : la chaire « Économie du gaz ».

La création de cette chaire résultait d'**une série de constats sur la pertinence scientifique et sociétale des questionnements liés aux sujets gaziers** (notamment dans un contexte de transition énergétique et d'essor de nouvelles technologies) **et sur les opportunités offertes par la complémentarité des expertises en présence**.

En réponse, la chaire s'est fixée les objectifs suivants :

- avancer la connaissance scientifique en économie appliquée à l'énergie gazière ;
- promouvoir sur ce thème des travaux de recherche ambitieux destinés à être publiés dans les meilleures revues de la discipline ;
- développer les compétences des chercheurs impliqués dans la chaire en facilitant leur insertion dans les réseaux internationaux ;
- contribuer à la modernisation des enseignements sur ces sujets.

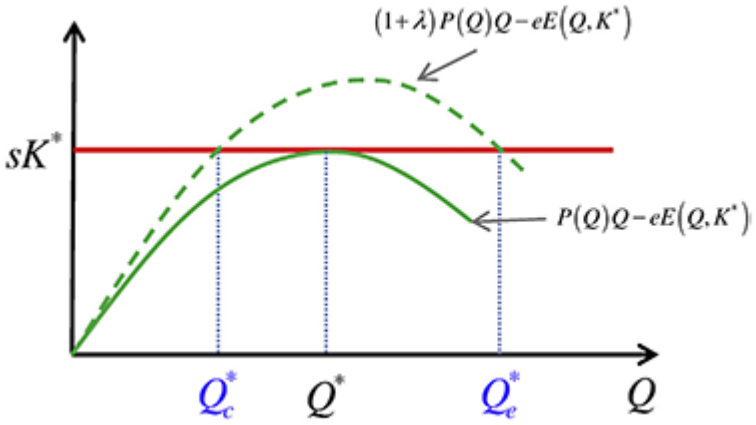
Soutenue par l'industrie (EDF, GRTGaz et Total) **via la Fondation des Mines**, **la chaire s'est dotée d'une organisation légère et d'une gouvernance conforme aux standards académiques internationaux**. L'identification des sujets traités et l'évaluation des travaux sont ainsi assurées par **un conseil scientifique indépendant**, **composé de chercheurs renommés**[1]**.**

À ce jour, **la chaire a initié cinq projets doctoraux**.

Quatre de ces thèses viennent d'être soutenues et présentent des contributions nouvelles sur :

- l'intégration spatiale des marchés gaziers[2] ;
- l'économie de la flexibilité de la chaîne d'approvisionnement gazière[3] ;
- l'économétrie de la demande d'énergie[4] ;
- et l'apport de la théorie des réseaux économiques dans la modélisation de la transition vers des sociétés bas carbone[5].

En parallèle, **les chercheurs impliqués dans la chaire ont également mené des travaux sur** des questions diverses telles que **la représentation techno-économique du transport gazier**, **le comportement des opérateurs régulés** (figure) ou encore **la détection du pouvoir de marchés dans une industrie gazière libéralisée**.



Comportement d'un opérateur de pipeline régulé soumis à une augmentation de demande [3]

En trait plein la situation envisagée en l'absence d'augmentation : le volume Q est tel que le profit comptable (en vert) atteint le niveau de rémunération du capital autorisé (contrainte rouge).*

En pointillé, la situation d'une augmentation de demande : la satisfaction de la contrainte de régulation impose un ajustement de la production à la hausse (expansion à Qe) ou à la baisse (contraction à Qc).

La chaire a aussi organisé deux conférences internationales à Paris et des séminaires dédiés, **animés par des chercheurs étrangers**. Les travaux de la chaire se sont traduits à ce jour par **14 publications scientifiques** (ex. [1-4]) **et plus d'une cinquantaine de communications** lors de conférences et séminaires académiques.

Pour **IFPEN**, la dynamique initiée au sein de cette chaire contribue directement à l'avancée des travaux de **recherche fondamentale** menés dans le cadre du Verrou scientifique n° 9 « Évaluer les enjeux économiques et environnementaux de la transition énergétique ».

Au sein d'**IFP School**, les initiatives promues par la chaire ont permis d'adapter les enseignements d'économie de l'énergie afin de mieux préparer les étudiants aux enjeux contemporains et à venir. Ainsi, ils bénéficient désormais d'une formation aux outils et méthodologies modernes (basés sur des notions de théorie des jeux) permettant de modéliser et analyser la formation des prix et les échanges commerciaux dans une industrie de réseau, en présence de concurrence imparfaite. **Sur le plan pédagogique, la chaire a également permis de concevoir des études de cas directement inspirées par l'actualité de l'industrie et celle des débats de politique énergétique**.

Pour l'avenir, **de nouveaux sujets** sont **à l'étude** et concernent des thèmes **tels que le design des architectures de marché adaptées à la convergence des systèmes électriques et gaziers** ou **l'identification des barrières au déploiement des nouvelles technologies de l'énergie sur ces systèmes combinés**. La recherche sur ces questions s'appuiera largement sur la mise en œuvre des développements méthodologiques initiés au cours des quatre dernières années.

1- Le conseil scientifique rassemble les Professeurs Steven A. Gabriel (université du Maryland), Christian von Hirschhausen (TU Berlin et DIW), Michele Polo (U. Bocconi) et Robert Ritz (université de Cambridge, Président du Conseil).

2- Ekaterina Dukhanina (2020), "***Integration of gas markets : Europe and beyond***". Thèse soutenue à MinesParisTech.
3- Amina Baba (2020), « ***La flexibilité sur le marché du gaz naturel*** ». Thèse soutenue à l'université Paris-Dauphine.
4- Arthur Thomas (2020), « ***La demande de gaz naturel dans la transition énergétique*** ». Thèse soutenue à l'université de Nantes.
5- Côme Billard (2020), « ***Connections Vertes : Appliquer l'Economie des Réseaux à la Transition Energétique*** ». Thèse soutenue à l'université Paris-Dauphine.

---

[1] *A. Thomas, O. Massol, B. Sévi (2021).* ***How are day-ahead prices informative for predicting the next day's consumption of natural gas? Evidence from France****. The Energy Journal, (Accepted & Forthcoming).*
>> DOI: 10.2139/ssrn.3388794

[2] *A. Baba, A. Creti, O. Massol (2020).* ***What can be learned from the free destination option in the LNG imbroglio?*** *Energy Economics, Vol. 89: 104764.*
>> DOI: 10.1016/j.eneco.2020.104764

[3] *F. Perrotton, O. Massol (2020).* ***Rate-of-return regulation to unlock natural gas pipeline deployment: Insights from a Mozambican project****. Energy Economics, 85, 104537.*
>> DOI: 10.1016/j.eneco.2019.104537

[4] *O. Massol, A. Banal-Estañol (2018).* ***Market Power and Spatial Arbitrage between Interconnected Gas Hubs****. The Energy Journal, Vol. 39 (SI2), 67-95.*
>> DOI: 10.5547/01956574.39.SI2.omas

Contact scientifique : Olivier Massol

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

Résultats et perspectives de la chaire « Économie du gaz »

L’électrification du groupe motopropulseur des véhicules est une des clés de la mobilité durable et l’hybridation avec des moteurs thermiques est de plus en plus répandue. Dans ce contexte, l’hybridation légère « à 48 volts » est une option à faible coût, flexible et simple à intégrer, avec des contraintes de sécurité allégées et des performances remarquables.

Néanmoins, **les systèmes 48 volts** sont généralement destinés à des niveaux de puissance relativement faibles, ne pouvant offrir qu’**un couple d’assistance pour la propulsion et une récupération limitée d’énergie de freinage**. Ces limitations sont le résultat de l’utilisation de la basse tension du côté de la source (batterie) et du côté de la charge (moteur électrique).

Une approche innovante a été conduite par une équipe d’enseignants-chercheurs et d’élèves **d’IFP School** sur la base d’un projet de fin d’études du **programme Powertrain Engineering** : **une démarche d’optimisation qui combine** une **structure améliorée du groupe motopropulseur** avec une **stratégie dynamique de la gestion énergétique**. Cette combinaison **permet de surmonter les limitations initiales** et de fonctionner à des puissances électriques élevées jusqu’à permettre une propulsion tout électrique en milieu urbain pour un véhicule à hybridation légère[1].

Transmettre une forte puissance à basse tension impose des contraintes sévères sur la batterie et sur le moteur électrique : stress thermique et vieillissement prématuré, forts courants et pertes considérables. L’analyse approfondie de ces contraintes a conduit à séparer leurs dynamiques et à les distribuer sur les différents composants du système énergétique embarqué.

Au niveau de la source, il a été décidé de combiner une source de puissance (supercondensateur) pour satisfaire les dynamiques rapides et une source d’énergie (batterie 48 V) pour satisfaire les dynamiques lentes. Quant à la charge, elle est assumée par deux moteurs électriques judicieusement dimensionnés et positionnés (figure 1).

Cette configuration a été complétée par la mise en place d’une stratégie dynamique de gestion énergétique durant tout le cycle de conduite (figure 2). En fonction des performances requises, des objectifs de réduction de consommation et de l’état de charge de la batterie, l’architecture fonctionnelle du groupe motopropulseur s’auto-adapte en temps réel. La stratégie de gestion énergétique peut alors faire appel au mode tout électrique (MG1+MG2), au mode hybride série (MG2), au mode hybride parallèle (ICE+MG2) ou au mode thermique conventionnel (ICE).

Cliquer sur l'image pour l'agrandir

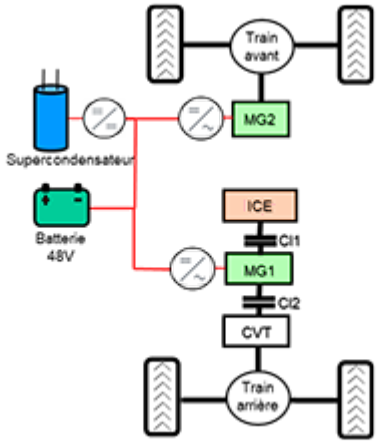


Figure 1 : Architecture mild-hybride proposée
MG : Moteur/Générateur ; ICE : Moteur thermique
(Internal Combustion Engine) ;
CVT : Transmission à variation continue ; CL : Clutch (embrayage)

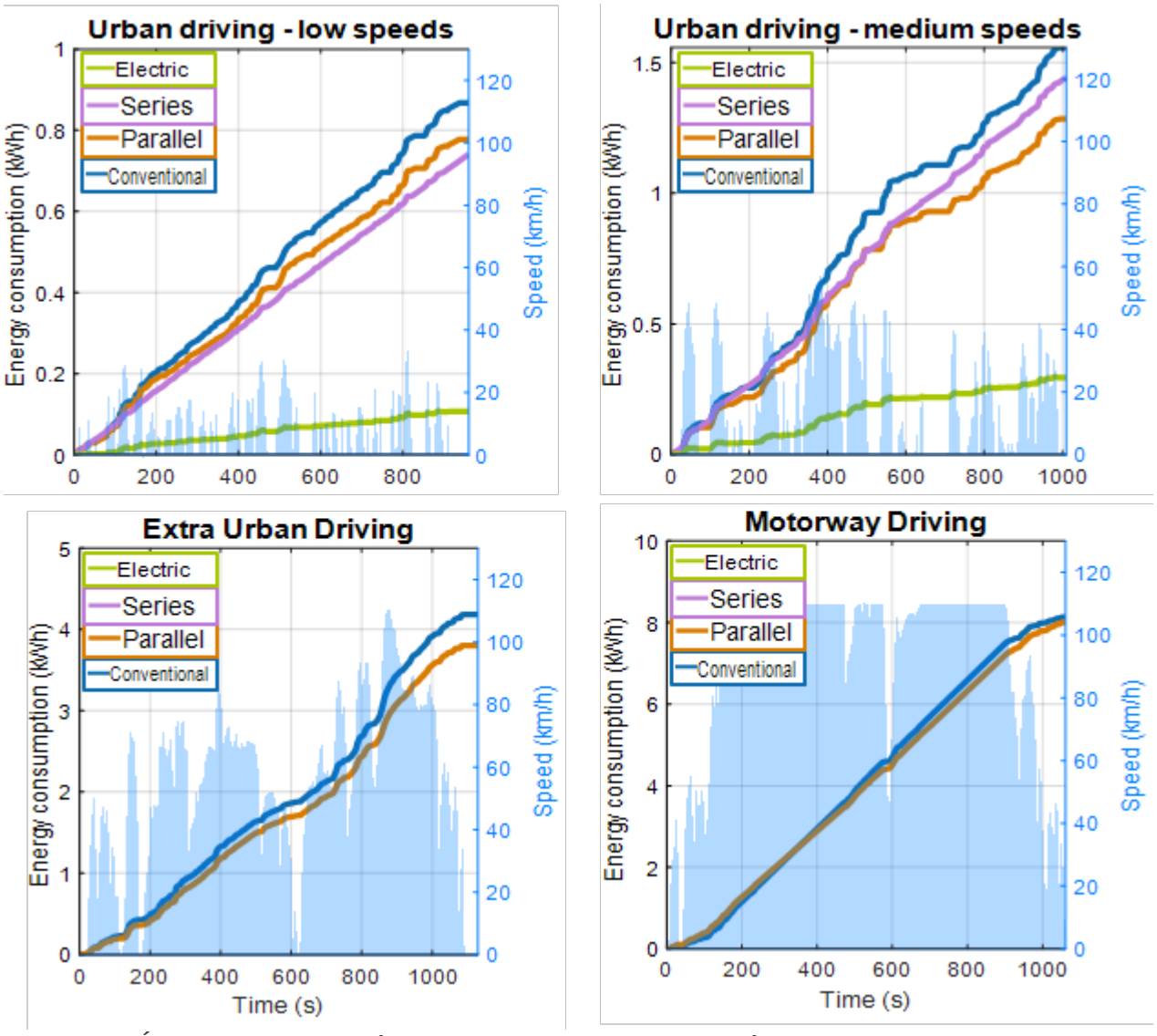


Figure 2 : Énergie consommée en fonction du mode activé

L'architecture de propulsion et la stratégie de gestion énergétique proposées offrent **une très grande flexibilité de fonctionnement avec la possibilité de réduire la consommation et les émissions de polluants à coût réduit**, avec **une intégration simplifiée**.

Sur la base de ces résultats, **un nouveau projet en cours** s'intéresse à **la possibilité d'utiliser le système 48 volts à des niveaux de puissance très élevés, adaptés au véhicule tout électrique urbain**.

[1] O. El Ganaoui-Mourlan, E. Miliani, D. Carlos Da Silva, M. Couillandeau et al., ***Design of a Flexible Hybrid Powertrain Using a 48 V-Battery and a Supercapacitor for Ultra-Light Urban Vehicles****, SAE Technical Paper 2020-01-0445, 2020*
>> DOI: 10.4271/2020-01-0445

Contact scientifique : el-hadj.miliani@ifpen.fr

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Innovation et industrie
Actualités février 2021

IFPEN mise sur la mobilité hydrogène

Communiqués de presse

Énergies renouvelables **Hydrogène** **Mobilité durable** **Mobilité électrifiée** **Motorisations thermiques**

Recherche fondamentale

Événements 16 - 18 juin 2021

LES4ECE : La Simulation aux grandes échelles pour les moteurs électriques, hybrides ou thermiques

Les rencontres scientifiques d'IFPEN



Enjeux et prospective

Études environnementales juillet 2018

L’électrification des véhicules : une solution efficace pour réduire l’empreinte environnementale des transports

Études économiques

Mobilité durable | Mobilité électrifiée

Économie | Évaluation de l'impact environnemental & ACV

Le système 48 volts : hybride léger à fort potentiel

La période 2012-2020 durant laquelle IFP School a abrité la chaire d'enseignement et de recherche sur cette thématique[1] a aussi été celle d'une profonde mutation de l'analyse économique portant sur l'environnement et l'énergie, avec en particulier l'accélération de questionnements en lien avec le développement durable.

Les questions couvertes par la chaire ont concerné les interactions entre, d'une part, **les changements énergétiques et environnementaux liés à la transition écologique et**, d'autre part, **la croissance économique et les marchés de l'énergie**.

Ainsi, **les résultats obtenus** dans le cadre de la chaire **ont mis en avant l'impact des mécanismes de marché sur les mix énergétiques**[2]. L'utilisation de modèles à changements de régimes markoviens[3] a permis de mettre en évidence l'incidence du développement des productions électriques renouvelables intermittentes sur les prix de l'électricité[1].

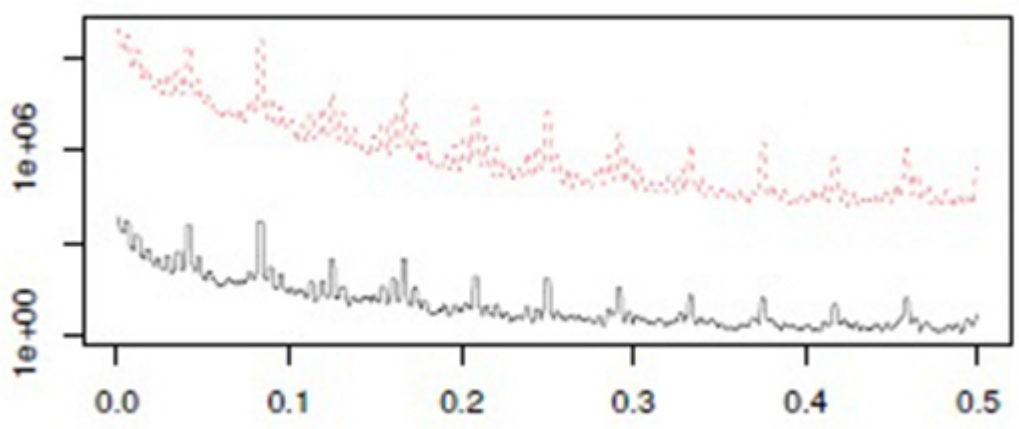
On identifie ainsi **un régime de prix faible lorsque la part des énergies renouvelables (ENR) dans le mix électrique est élevée et un régime de prix élevé dans le cas contraire**. Accroître la proportion des énergies éolienne et solaire dans la production d'électricité a par conséquent pour effet d'accroître la probabilité de passer d'un régime de prix élevé à un régime de prix faible.

La figure ci-dessous illustre ce phénomène de deux manières distinctes sur l'exemple allemand avec :

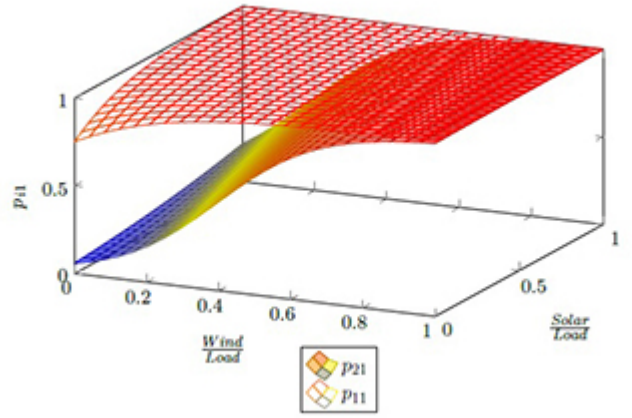
- à gauche, le prix de marché de l'électricité étroitement en phase avec la distribution de la courbe de charge résiduelle (production non renouvelable compensant l'intermittence des ENR) ;
- à droite, la probabilité de passer dans le régime de prix faible (axe vertical) qui dépend de la part des énergies renouvelables dans le mix électrique.

Les activités de la chaire ont été menées **au travers de sept thèses de doctorat** et **ont conduit à de multiples articles dans des revues à comité de lecture** : par exemple, sur **la décarbonation du mix électrique dans les pays exportateurs de pétrole**[2] et sur **la croissance économique et le développement des énergies renouvelables**[3].

Ces activités se sont **également traduites dans les enseignements dispensés à IFP School** et ont permis l'organisation de conférences annuelles où ont été invités des professeurs étrangers.



Périodogramme des prix (en noir, €/MWh) et de la courbe de charge résiduelle (en rouge, MWh) en Allemagne (2014-2015)



Probabilité de transition vers un régime de prix faible en fonction de la part des ENR dans le mix électrique

1- Chaire financée par la **Fondation Tuck**
2- Par exemple ceux obtenus par C. De Lagarde (2018) « ***Promoting renewable energy : subssidies, diffusion, network price and market impacts*** ». Thèse soutenue à l'Université Paris Dauphine-PSL.
3- Les modèles à changements de régimes markoviens sont employés afin de décrire les cycles conjoncturels, tout en permettant de capter des chocs (crises, ruptures). Sont qualifiés de markoviens des processus relatifs à des systèmes aléatoires dont l'évolution future ne dépend du passé qu'au travers de l'information actuelle.

---

[1] *C. de Lagarde , F. Lantz, 2018,* ***How renewable production depresses electricity prices: evidence from the German market****, Energy Policy, Vol 117, pp. 263-277*
>> DOI: 10.1016/j.enpol.2018.02.048

[2] *A. Farnoosh, F. Lantz, J. Percebois (2014),* ***Electricity generation analyses in an oil-exporting country: Transition to non-fossil fuel based power units in Saudi Arabia****. Energy 05/2014; 69.*
>> DOI: 10.1016/j.energy.2014.03.017

[3] *V. Court, P-A. Jouvet, F. Lantz, (2018),* ***Long-term endogenous economic growth and energy transitions****, The Energy Journal, Vol. 39, 1,*
>> DOI: 10.5547/01956574.39.1.vcou

Contact scientifique : Frédéric Lantz

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Enjeux et prospective

Actualités mai 2018

Croissance économique et transition énergétique : un nouveau modèle pour guider l'action publique en faveur du développement durable

Économie | Macroéconomie | Modélisation économique

Modélisation économique appliquée à l'environnement et aux énergies

L’imagerie sismique reste encore un outil important dans la caractérisation des réservoirs géologiques. Dans le cas des réservoirs carbonatés, l’origine biologique des sédiments, ainsi que leur transformation au cours du temps lors de la diagenèse , apporte de nombreuses hétérogénéités de structure[1].

L’interprétation géologique des réflecteurs sismiques observés dans ces réservoirs **peut se révéler très difficile du fait du peu d’observations directes**, limitées le plus souvent au niveau des puits d’exploration. **Des variations latérales de faciès[2] peuvent alors entraîner des interprétations fausses et induire** par exemple **des erreurs** dans l’identification des zones riches en fluides.

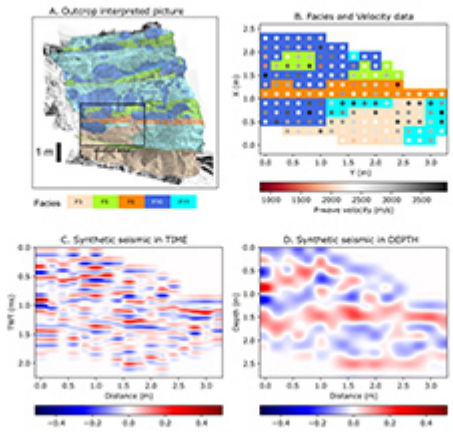
Un moyen d’établir le lien entre faciès géologique et signature sismique est d’étudier, à l’affleurement, **des roches analogues aux réservoirs carbonatés situés en profondeur**[1]. Actuellement, **un projet de recherche IFPEN étudie une formation carbonatée lacustre appartenant à la formation Green River**, d’âge Eocène, affleurant **dans le sud-ouest du Wyoming** (USA). On y caractérise un affleurement d’échelle métrique, d’un point de vue sédimentologique et diagénétique, **afin de transformer en image sismique les différents faciès carbonatés** (figure A), **grâce à la mesure des vitesses acoustiques d’ondes P**[3] (figure B).

Une modélisation sismique classique a été réalisée, **en traduisant ces vitesses en réflecteurs sismiques**. Cette modélisation se réalise tout d’abord dans le domaine temporel puis elle est convertie en équivalent profondeur grâce à une loi de vitesse issue des mesures réalisées sur l’affleurement. La différence entre l’image en temps (figure C) et l’image en profondeur (figure D) est représentative de ce qui peut être observé à grande échelle, en sismique de réservoir. **Ce passage temps–profondeur est un enjeu majeur**, surtout pour ce type de milieu fortement hétérogène en termes de vitesses de propagation des ondes.

Les réflecteurs sismiques sont classiquement utilisés en modélisation de bassin et de réservoir comme des surfaces correspondant à un même âge géologique (dépôt ou érosion). **L’étude confirme** , à petite échelle, **que cette interprétation peut se révéler erronée**, un réflecteur sismique pouvant correspondre à un changement de faciès au sein d’un même dépôt géologique. En l’absence d’une bonne connaissance sédimentologique des roches carbonatées imagées, il est donc possible de mal interpréter ces objets géophysiques.

L’étude démontre également **l’importance des études d’analogues sur le terrain**, seul moyen d’obtenir toutes les données nécessaires pour mettre en relation les mesures géophysiques avec la réalité sédimentologique.

Cliquer sur l'image pour l'agrandir



A : Affleurement interprété en faciès carbonatés.
B : Discrétisation des faciès et des mesures de vitesses réalisées sur l'affleurement.
C : Sismique synthétique en temps.
D : Sismique synthétique en profondeur.

1- Ensemble des processus physico-chimiques et biochimiques qui interviennent dans la transformation des sédiments en roches sédimentaires.
2- Aspect revêtu par une roche sédimentaire : ensemble de ses caractères lithologiques (minéralogie, géométrie, structure sédimentaire, etc.) ou paléontologiques (contenu en fossiles).
3- Onde élastique de compression, c'est l'onde sismique qui se propage le plus rapidement au travers d'un volume rocheux.

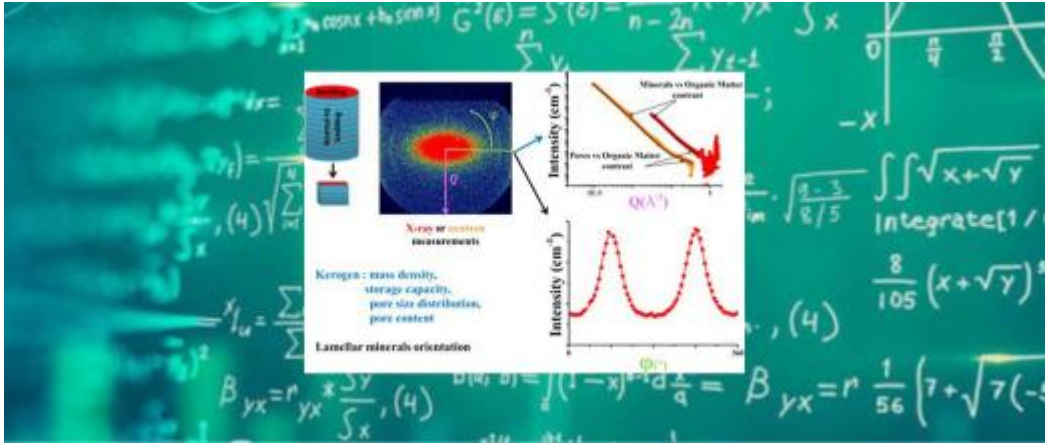
---

[1] *C. Bailly, J. Fortin, M. Adelinet, Y. Hamon. (2019).* ***Upscaling of Elastic Properties in Carbonates: A Modeling Approach Based on a Multiscale Geophysical Data Set****; Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 124(12), 13021-13038.*
>> *DOI: 10.1029/2019JB018391*

Contact scientifique : Mathilde Adelinet

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

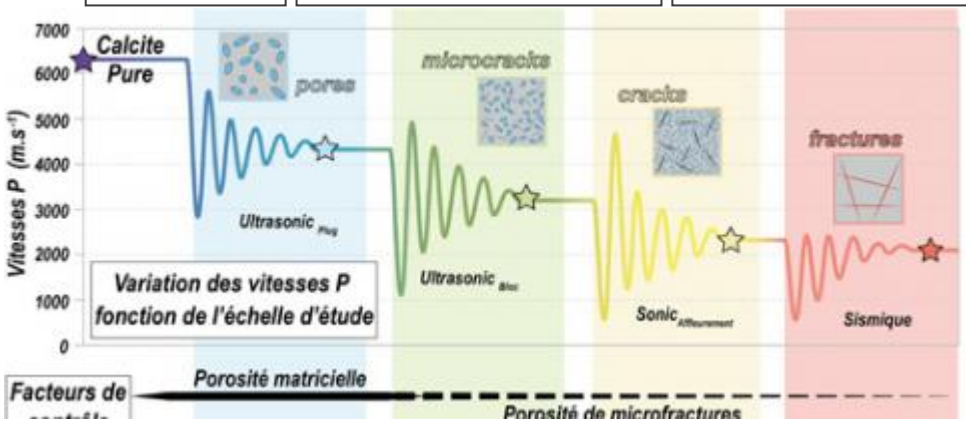


Recherche fondamentale

Actualités décembre 2020

De nouvelles méthodes pour caractériser la porosité des roches-mères

Géosciences | Géologie - Sédimentologie | Analyse et caractérisation



Caractérisation et modélisation du couple faciès(a)-éogenèse(b), état initial des réservoirs carbonatés (HDR 2017)

Les réservoirs carbonatés présentent de fortes hétérogénéités (de types et d'échelles) liées à l'origine biologique des sédiments[c], mais également aux tr

Géosciences | Géologie - Sédimentologie | Géostatistique - Modélisation géologique | Pétrophysique et transferts en milieux poreux

De l’affleurement au réservoir : merci aux ondes sismiques !

À la différence des molécules d'hydrocarbures d'origine fossile, celles issues de la biomasse sont polaires, en raison des hétéro-atomes qu'elles renferment. Cette différence à l'échelle moléculaire induit un comportement macroscopique plus complexe dont il faut tenir compte pour le dimensionnement des procédés qui les mettent en œuvre.

En outre, **si la variété des molécules rencontrées dans les fluides pétroliers est grande**, **elle l'est nettement plus dans la biomasse**. **Ceci rend impossible la réalisation de mesures sur chaque molécule ou sur chaque combinaison d'entre elles, en vue de caler les modèles thermodynamiques traditionnels**. **Disposer de moyens prédictifs pour calculer les propriétés de ces mélanges** de manière purement théorique, à partir de la structure moléculaire, **devenait dès lors une nécessité**.

L'objectif de la chaire de recherche et d'enseignement « ***Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse*** » **était la construction d'une telle méthode prédictive**.

Pour cela, les chercheurs se sont appuyés sur des travaux académiques initiés dans les années 90 proposant des méthodes basées sur de la mécanique statistique pour construire des modèles thermodynamiques (équations d'état SAFT).

Une liste non exhaustive des travaux menés au sein de la chaire, notamment au travers de thèses, permet d'illustrer les avancées obtenues :

- une méthode basée sur les contributions de groupes a été utilisée pour calculer les équilibres de phase pour des mélanges de molécules identifiées dans la biomasse[1]. Elle se concrétise par le modèle GC-PPC-SAFT dont le nom traduit le contenu[2,3] ;
- pour combler la limite du modèle vis-à-vis de molécules ayant de nombreuses fonctionnalités oxygénées, une méthodologie a été mise au point pour étendre les contributions de groupes en prenant en compte la distance entre groupes[4] ;
- pour certaines molécules de la biomasse aux formes particulièrement complexes, tel le guaiacol, la description moléculaire a dû être adaptée au solvant dans lequel la molécule se trouve (la figure en montre un exemple)[5] ;
- le modèle développé a aussi été confronté à des mesures de solvatation (soluté dans solvant) lors d'une collaboration avec une équipe de l'université de Kazan[6] ;
- GC-PPC-SAFT a également été utilisé dans le contexte des procédés d'estérification servant à la conversion des huiles végétales en carburant[7] ;
- enfin, pour dimensionner le procédé d'hydrotraitement des fluides issus de la biomasse, et les rendre ainsi compatibles avec les carburants pétroliers, la solubilité de l'hydrogène dans ces fluides a été étudiée[8].

Cliquer sur l'image pour l'agrandir

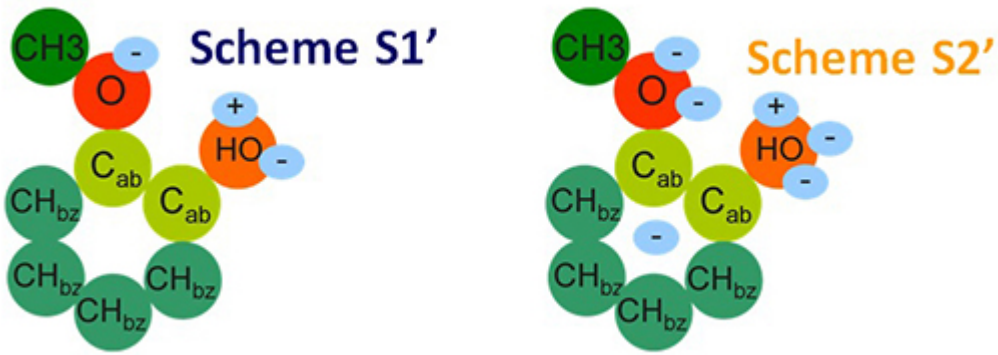


Illustration du principe des contributions de groupe pour la molécule de guaiacol : chaque boule représente un groupe, certains pouvant porter un site associatif (positif ou négatif) qui permet à la molécule de créer des liaisons hydrogène avec ses voisines. Plusieurs schémas de distribution de ces sites ont été étudiés.

Grâce aux travaux de cette chaire de recherche, IFPEN dispose aujourd'hui d'un outil de type « équation d'état », pour mieux comprendre et décrire les mélanges issus de la biomasse, avec leurs composés oxygénés. Il est désormais d'**un usage courant dans des projets de recherche appliquée**.

1- Chaire de la **Fondation Tuck**, 2009 à 2018.
2- Statistical Associating Fluid Theory.
3- Consistant à découper les molécules en fragments, bien moins nombreux que les molécules (exemple sur la figure) dont on considère que chacun contribue pour une partie à la propriété désirée.
4- GC pour les contributions de groupes et P parce qu'il comporte un terme polaire, tout en se basant sur la variante Perturbed Chain de SAFT

---

[1] *D. Nguyen-Huynh, J.-C. de Hemptinne, R. Lugo, J.-P. Passarello, P. Tobaly,* ***Simultaneous liquid–liquid and vapour–liquid equilibria predictions of selected oxygenated aromatic molecules in mixtures with alkanes, alcohols, water, using the polar GC-PC-SAFT*** *(Prédictions simultanées d'équilibres liquide-liquide et vapeur-liquide de certaines molécules aromatiques oxygénées dans des mélanges avec des alcanes, des alcools et de l'eau, à l'aide du GC-PC-SAFT polaire), 92 (2014) 2912–2935.*
>> https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876214002470

[2] *T.-B. Nguyen, J.-C. de Hemptinne, B. Creton, G.-M. Kontogeorgis,* ***Characterization Scheme for Property Prediction of Fluid Fractions Originating from Biomass*** *(Schéma de caractérisation pour la prédiction des propriétés des fractions fluides issues de la biomasse), ENERG FUEL 29 (2015) 7230–7241.*
>> http://dx.doi.org/10.1021/acs.energyfuels.5b00782

[3] *T.-B. Nguyen, J.-C. de Hemptinne, B. Creton, G.-M. Kontogeorgis,* ***Improving GC-PPC-SAFT equation of state for LLE of hydrocarbons and oxygenated compounds with water*** *(Amélioration de l'équation d'état GC-PPC-SAFT pour la LLE des hydrocarbures et des composés oxygénés avec de l'eau), Fluid Phase Equilib. 372 (2014) 113–125.*
>> http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381214002064

[4] *M. Jaber, W. Babe, E. Sauer, J. Gross, R. Lugo, J.-C. de Hemptinne,* ***An improved group contribution method for PC-SAFT applied to branched alkanes: Data analysis and parameterization*** *(Une méthode de contribution de groupe améliorée pour PC-SAFT appliquée aux alcanes ramifiés: analyse et paramétrage des données), Fluid Phase Equilib. 473 (2018) 183–191.*
>> https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381218302504

[5] *L. Grandjean, J.-C. de Hemptinne, R. Lugo,* ***Application of GC-PPC-SAFT EoS to ammonia and its mixtures*** *(Application de GC-PPC-SAFT EoS à l'ammoniac et ses mélanges), Fluid Phase Equilib.*

367 (2014) 159–172.
>> http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2014.01.025

[6] *M.-A. Varfolomeev, R.-N. Nagrimanov, M.-A. Stolov, N. Ferrando, R. Lugo, J.-C. de Hemptinne,* ***Guaiacol and its mixtures: New data and predictive models. Part 2: Gibbs energy of solvation*** *(Guaiacol et ses mélanges: nouvelles données et modèles prédictifs. Partie 2 : énergie de solvatation de Gibbs), Fluid Phase Equilib. 470 (2018) 91–100.*
>> https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381218301420

[7] *C.-G. Pereira, L. Grandjean, S. Betoulle, N. Ferrando, C. Fejean, R. Lugo, J.-C.-de Hemptinne, P. Mougin,* ***Phase equilibria of systems containing aromatic oxygenated compounds with CH_4, CO_2, H_2, H_2S, CO and NH_3: Experimental data and predictions*** *(Équilibres de phase des systèmes contenant des composés oxygénés aromatiques avec CH_4, CO_2, H_2, H_2S, CO et NH_3 : Données expérimentales et prédictions), Fluid Phase Equilib. 382 (2014) 219–234.*
>> http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381214004567

[8] *T.-K.-H. Trinh, J.-P. Passarello, J.-C. de Hemptinne, R. Lugo,* ***Use of a non additive GC-PPC-SAFT equation of state to model hydrogen solubility in oxygenated organic compounds*** *(Utilisation d'une équation d'état GC-PPC-SAFT non additive pour modéliser la solubilité de l'hydrogène dans des composés organiques oxygénés), Fluid Phase Equilib. 429 (2016) 177–195.*
>> http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381216303776

[9] *T.-K.-H. Trinh, J.-C. de Hemptinne, R. Lugo, N. Ferrando, J.-P. Passarello,* ***Hydrogen Solubility in Hydrocarbon and Oxygenated Organic Compounds*** *(Solubilité de l'hydrogène dans les composés organiques hydrocarbonés et oxygénés), J. Chem. Eng. Data 61 (2016) 19–34.*
>> https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.jced.5b00119

Contact scientifique : Jean-Charles De Hemptinne

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

Formation et carrières

Actualités avril 2021

Nouvelle chaire dédiée à la thermodynamique des électrolytes



Recherche fondamentale

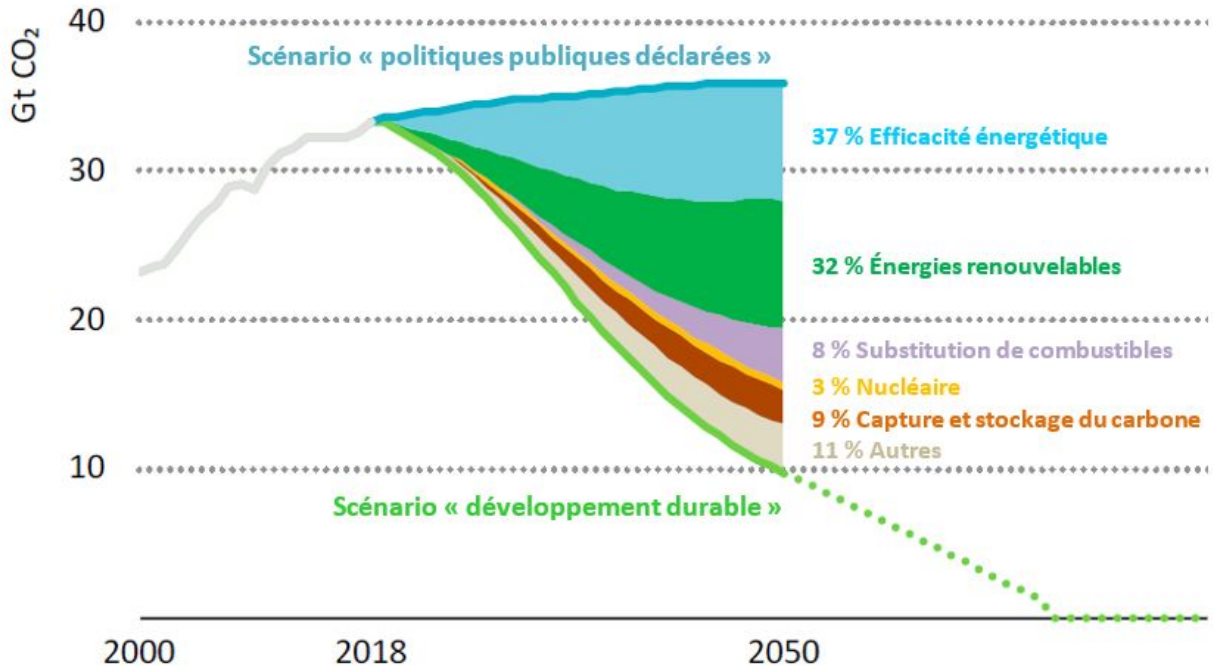
Événements 05 - 09 juillet 2021

ESAT 2021 : accès au replay !

Sciences physiques | Thermodynamique / Modélisation moléculaire

Retour sur une chaire en thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse

Dans son scénario « développement durable », l'Agence internationale de l'énergie (AIE) considère que l'efficacité énergétique est le premier levier pour réduire les émissions de CO_2 (voir figure). Le Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC) estime lui aussi que l'efficacité énergétique est un élément clé de la transition écologique. Il en va d'ailleurs ainsi pour tous les gouvernements engagés dans l'Accord de Paris**. Mais il se pourrait que cette stratégie ne fonctionne pas, car elle omet un phénomène qui œuvre depuis longtemps pour contrer les bénéfices de l'efficacité énergétique : l'« effet rebond ».**



Facteurs de réduction des émissions de CO2 liées à l'énergie
pour atteindre le scénario « développement durable » de l'AIE [1]

Ce phénomène résulte de l'ensemble des mécanismes économiques et comportementaux qui annulent une partie, ou la totalité, des économies d'énergie résultant des gains d'efficacité. L'ampleur des effets rebond est difficile à quantifier, mais une tendance se dégage dans les connaissances que nous avons de ce phénomène.

Une étude récente, à laquelle a pris part IFPEN[2], a montré que **les preuves d'un effet rebond très significatif** étaient **de plus en plus nombreuses** : plus de la moitié des économies d'énergie résultant d'une amélioration de l'efficacité énergétique semble ainsi ne jamais se concrétiser dans la réalité. **Une question clé** est alors de **savoir si ces effets rebond sont correctement pris en compte dans les modèles énergétiques et climatiques mondiaux**.

Dans cette même **étude, quatre des « modèles d'évaluation intégrés » utilisés par le GIEC ont été examinés, ainsi que les modèles utilisés par BP, Shell, l'AIE et l'US Energy Information Administration** (EIA). Le **constat** a été que **la plupart de ces modèles étaient incapables de saisir un grand nombre des mécanismes contribuant à l'effet rebond**. Cette analyse suggère donc que **les modèles en question surévaluent les économies d'énergie effectivement réalisables**. En d'autres termes, **la demande énergétique mondiale semble significativement sous-estimée dans les scénarios** qui orientent la prise de décision politique.

Puisqu'environ 50 % des économies d'énergie semblent contrebalancées par l'effet rebond, **il est urgent que la communauté des modélisateurs considère ce phénomène plus sérieusement** et que ceux-ci parviennent à mieux l'intégrer dans leurs équations. Sans cela, la crédibilité des scénarios climatiques mondiaux pourrait être sujette à caution, a fortiori pour ceux qui se fondent sur un découplage fort entre activité économique et consommation d'énergie.

---

[1] International Energy Agency, World Energy Outlook 2019, Paris, p. 79.

[2] P. E. Brockway , S. Sorrell, G. Semieniuk, M. K Heun, V. Court. ***Energy efficiency and economy-wide rebound effects: A review of the evidence and its implications****. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2021, vol. 141, 110781.*
>> DOI: 10.1016/j.rser.2021.110781

V. Court. The Conversation - 06/04/2021 :
>> ***La demande énergétique mondiale est sous-estimée, et c'est un vrai problème pour le climat***

Contact scientifique : Victor Court

>> NUMÉRO 44 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Enjeux et prospective

Regards économiques janvier 2026

IFPEN Economic Papers n°165 - "Market-Based deployment of Engineered Carbon Dioxide Removal Technologies in Europe"

Études économiques



Enjeux et prospective

Actualités juin 2020

Transition énergétique bas-carbone : quelles évolutions de la géopolitique de l’énergie ?

Communiqués de presse

Climat, environnement et économie circulaire | Analyse de cycle de vie (ACV) | Recyclage des métaux



Enjeux et prospective

Regards économiques janvier 2019

Smart City : les enjeux énergétiques de la ville durable

Études économiques

Biocarburants et e-fuels **Mobilité durable** **Analyse environnementale des transports**

Économie

ZOOM SUR LES OBJECTIFS CLIMATIQUES - Une contribution fortement surévaluée de l’efficacité énergétique ?

Numéro 44 de Science@ifpen - IFP School
24 mars 2021

Lien vers la page web :