



Science@ifpen

N° 48 - Juin 2022

Rédigé le 30 juin 2022



15 minutes de lecture



Actualités

Recherche fondamentale

Fertiliser par la recherche fondamentale les développements technologiques nécessaires à la transition énergétique est au cœur de la feuille de route d'IFPEN. Parmi les verrous identifiés pour aller vers la neutralité carbone en 2050, émerge au premier plan la nécessité d'affiner les descriptions paramétriques des procédés et systèmes de production et de transformation de l'énergie. Ceci passe par le remplacement progressif des approches globales caractérisant les entrées et les sorties de ces systèmes, par des méthodes reposant sur la connaissance de descripteurs qui pilotent le détail des mécanismes physico-chimiques en jeu, pour *in fine* établir des lois de comportement prédictives. Dans ce contexte, six faits marquants sont présentés dans ce numéro de Science@ifpen.

Les deux premiers concernent la chimoinformatique. D'abord appliquée à la maîtrise de la compatibilité entre un polymère et un fluide, point essentiel lors de la conception d'une chaîne d'alimentation en biocarburant. Un couplage fort entre des descripteurs moléculaires et des descripteurs du fluide est introduit, pour construire un ensemble de paramètres directement interprétables par des algorithmes d'apprentissage automatique. Ces algorithmes sont aussi utilisés pour identifier les propriétés chimiques qui contrôlent le vieillissement par oxydation des nouveaux carburants.

L'optimisation des catalyseurs est l'objet des deux notes suivantes. Une caractérisation des chemins tortueux suivis par les gaz est établie à partir de jumeaux numériques. L'optimisation des catalyseurs bénéficie aussi de l'intégration maintenant systématique de descripteurs catalytiques au sein des modèles de la cinétique chimique.

Sur un registre complémentaire, la compréhension de l'interaction entre tous les phénomènes non-linéaires associés à la turbulence et à la combustion de l'hydrogène dans un moteur à combustion interne progresse à travers l'introduction de descripteurs reposant sur de nouvelles décompositions modales des signaux aérodynamiques issus de simulations.

Enfin, affiner la prédiction des modifications attendues d'un trait côtier s'organise à IFPEN autour de la mise en place de descripteurs spécifiques, qui combinent l'historique de données satellitaires avec des informations issues du terrain.



Luc Vervisch

Président du [Conseil scientifique d'IFPEN](#)

Professeur à l'[INSA Rouen Normandie](#)

Membre de l'[Institut Universitaire de France](#)

LES BRÈVES

Maîtriser la compatibilité entre polymères et fluides est essentiel dans de nombreux secteurs de l'industrie, comme par exemple dans l'automobile avec la question de la tenue des matériaux du système d'alimentation en carburant. Pour les composants concernés, des méthodes expérimentales permettent d'anticiper d'éventuelles dégradations des propriétés initiales. Elles restent cependant très coûteuses en temps. Une approche alternative s'est avérée pertinente : utiliser des données existantes, en les complétant si nécessaire, pour en extraire de l'information via des méthodes issues de la science des données [1,2].

La chémoinformatique se situe à l'interface de plusieurs domaines scientifiques et consiste à utiliser des ressources informatiques pour résoudre des problèmes liés à la chimie. Une de ces déclinaisons est l'utilisation de l'intelligence artificielle pour prédire des propriétés d'usage. Outre la qualité des données, une des clés du succès réside alors dans la représentation des fluides complexes considérés, comme dans le cas des milliers de composés présents dans les carburants.

Malgré les avancées constantes des techniques d'analyse, identifier précisément chacun des constituants de ces fluides complexes paraît une tâche insurmontable. Grâce à la chromatographie bidimensionnelle (GC×GC), il est cependant possible de quantifier les familles chimiques présentes et d'obtenir des distributions en fonction du nombre d'atomes de carbone. A chaque composante de la distribution est associée une molécule représentative : à titre d'exemple, un carburéacteur^a peut ainsi être représenté structurellement par un mélange d'une centaine de composés [1].

Pour la rendre interprétable par des algorithmes d'apprentissage automatique, chacune de ces molécules doit être encodée par des descripteurs moléculaires. Comme il en existe un grand nombre, le choix s'est porté sur des descripteurs simples issus de dénombrements des groupes fonctionnels présents. Un vecteur descripteur encodant le fluide (figure 1) est ensuite obtenu grâce à une loi de mélange linéaire appliquée aux descripteurs, aux constituants et à leurs fractions respectives.

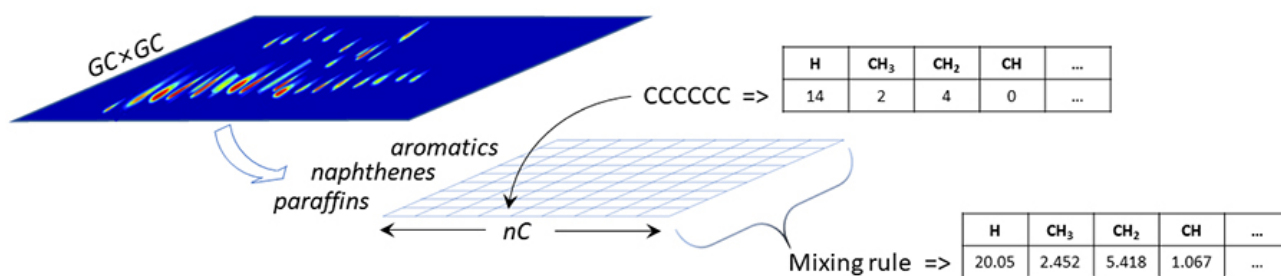


Figure 1 : Description d'un fluide complexe pour alimenter des algorithmes d'apprentissage automatique.

Cette méthodologie a été utilisée pour modéliser la quantité de fluide pénétrant dans un polymère lorsque ceux-ci sont mis en contact. Différents couples polymère/fluide ont ainsi été étudiés, des bases de données créées et des algorithmes d'apprentissage automatique appliqués.

Les modèles obtenus permettent d'anticiper instantanément l'impact sur les propriétés de divers polymères de l'ajout de biocarburants dans les essences, ou encore de l'utilisation de carburéacteurs alternatifs (figure 2).

Une telle approche de modélisation contribue à réduire drastiquement le temps nécessaire pour quantifier la compatibilité polymère/fluide.

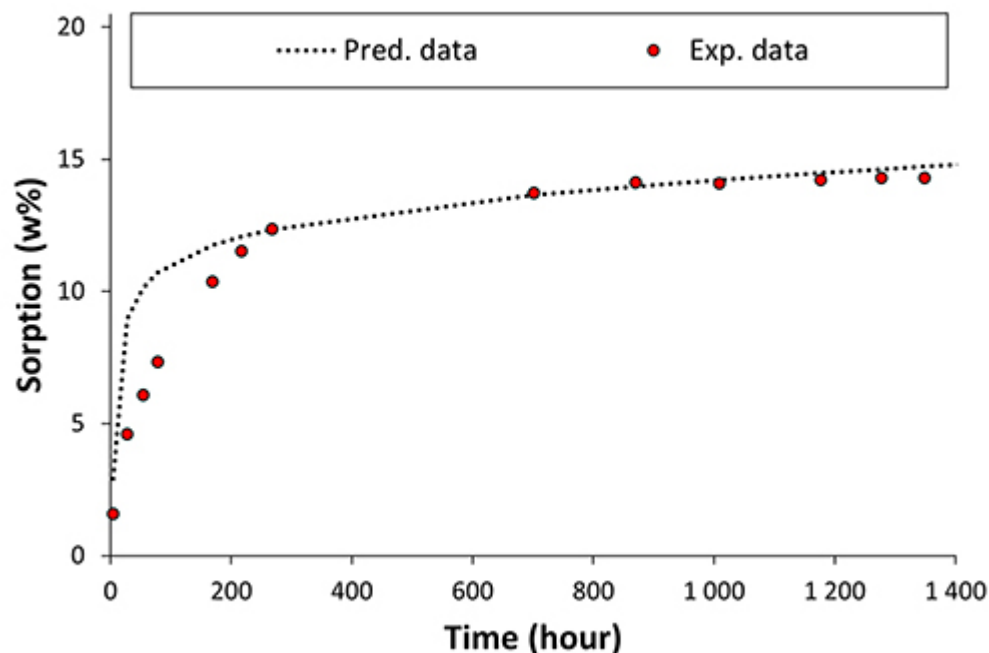


Figure 2 : Capacité des modèles à prédire la quantité d'un carburéacteur pénétrant dans un polymère (cas du NBR, Nitrile Butadiene Rubber - voir note b).

Dans ce contexte de la représentation des fluides complexes, au moins deux types de développements se dessinent :

- l'intégration de la génération in silico de structures [3] pour affiner la caractérisation ;
- l'application de cette méthodologie de modélisation à d'autres phénomènes, comme par exemple le vieillissement des fluides.

a- ou kérosène

b- matériau constitutif des circuits de carburant : réservoirs, tuyaux, joints

Références :

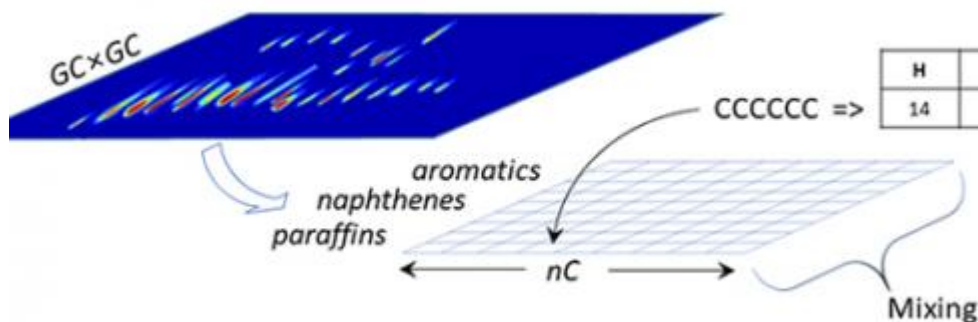
1. B. Creton, B. Veyrat, M.-H. Klopffer, **Fuel sorption into polymers: experimental and machine learning studies**, Fluid Phase Equilibria 2022, 556, 113403.
>> DOI: [10.1016/j.fluid.2022.113403](https://doi.org/10.1016/j.fluid.2022.113403)

2. N. Villanueva, B. Flaconnèche, B. Creton, **Prediction of alternative gasoline sorption in a semicrystalline poly(ethylene)**, ACS Combinatorial Science 2015, 17(10), 631-640.
>> DOI: [10.1021/acscombsci.5b00094](https://doi.org/10.1021/acscombsci.5b00094)
3. C. Hall, B. Creton, B. Rauch, U. Bauder, M. Aigner, **Probabilistic Mean Quantitative Structure Property Relationship modelling of Jet Fuels Properties**, Energy & Fuels, 2022, 36(1), 463-479.
>> DOI: [10.1021/acs.energyfuels.1c03334](https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c03334)

Contact scientifique : benoit.creton@ifpen.fr

>> NUMÉRO 48 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



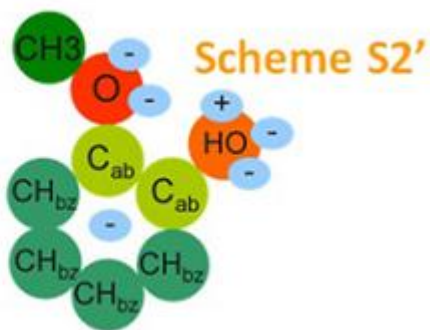
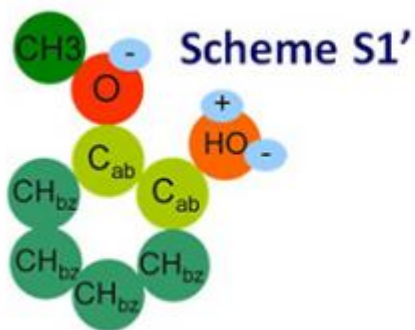
La chémoinformatique et ses descripteurs : application à la compatibilité polymères/fluides

Maîtriser la compatibilité entre polymères et fluides est essentiel dans de nombreux secteurs de l'industrie, comme par exemple dans l'automobile avec la question de la tenue des matériaux du système d'alimentation en carburant.

Analyse chimique

Thermodynamique / Modélisation moléculaire

Traitement du signal / Science des données



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

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.

Sciences physiques

Thermodynamique / Modélisation moléculaire



Recherche fondamentale



Actualités

février 2019

Simulation moléculaire et stockage du CO₂

Climat, environnement et économie circulaire

Captage, stockage et valorisation du CO₂

Sciences physiques

Thermodynamique / Modélisation moléculaire

La chémoinformatique et ses descripteurs : application à la compatibilité polymères/fluides

Dans les domaines d'innovation d'IFPEN, de nombreux fluides sont employés pour diverses applications allant de la production d'énergies renouvelables à la mobilité durable. Ces fluides sont bien souvent des mélanges complexes et la chimie de leurs composants (hydrocarbures, alcools, esters, etc.) varie en fonction de l'application ciblée : combustion, refroidissement, lubrification, isolation électrique... Quelle que soit cette application, il est primordial que les produits en question préservent dans le temps toutes leurs propriétés, d'où l'enjeu majeur de leur stabilité. A cet égard, la dégradation par oxydation est l'un des phénomènes susceptibles d'altérer la qualité de certains fluides et donc de limiter l'efficacité du système qui les emploie, voire de mener à des défaillances.

Dans ce contexte, un projet de recherche, lancé en collaboration avec l'université de Lille, héberge un travail doctoral^a centré sur la problématique de la réactivité des fluides. Il a pour but d'identifier les caractéristiques physiques et chimiques clés quant à prédire leur stabilité à l'oxydation. Pour y parvenir, l'originalité de ce travail est d'utiliser une approche basée sur l'établissement de modèles globaux (figure) qui confrontent et combinent deux approches d'apprentissage machine supervisé déjà employées séparément avec succès à IFPEN :

- la chémoinformatique et principalement le développement de modèles QSPR (*Quantitative Structure Property Relationship*). Ces modèles multivariés fournissent des valeurs de propriétés avec pour données d'entrée la structure et la composition moléculaires des fluides [1] ;
- la chimiométrie et plus particulièrement le développement de modèles basés sur la spectroscopie moyen infrarouge (MIR) ou proche infrarouge (PIR). Ces modèles multivariés, le plus souvent développés sur « composantes » (PCA^b, PLS^c), relient des propriétés d'intérêt aux bandes vibrationnelles caractéristiques des fluides analysés [2].

En exploitant les informations extraites de ces deux types de représentation, de nouveaux modèles pourront être construits. Capables de décrire et prédire efficacement la stabilité des fluides, ils contribueront alors :

- au développement de nouvelles formulations pour tenir compte des futures contraintes liées à de nouveaux usages, et même à l'identification de nouvelles filières produits, dans le cadre de la transition énergétique ;
- à la prédiction de leur réactivité dans les conditions opératoires réelles, en vue de proposer des solutions d'amélioration.

Ces modèles ont vocation à être ensuite implémentés dans des outils de simulation numérique, comme par exemple l'outil ReFGen^d, logiciel d'estimation de propriétés thermodynamiques pour les applications « Transports ».

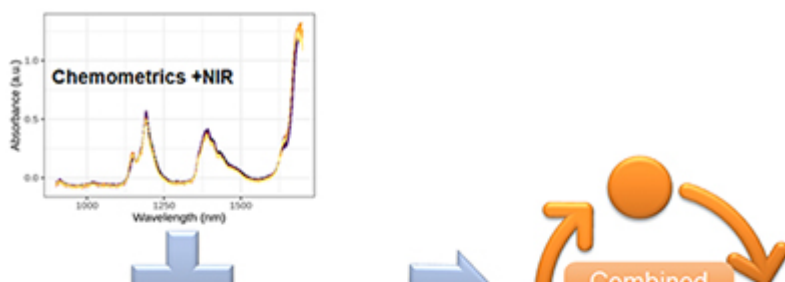


Figure : Schéma de développement et de validation des nouveaux modèles de prédiction de la stabilité des fluides.

- a- Titre de la thèse : « Recherche de descripteurs pour la compréhension et la prédiction de la stabilité à l'oxydation de fluides par apprentissage machine », réalisée par Adrian Venegas Reynoso
- b- Analyse en composantes principales
- c- Méthode des « moindres carrés partiels »
- d- *Representative Fuel Generator*

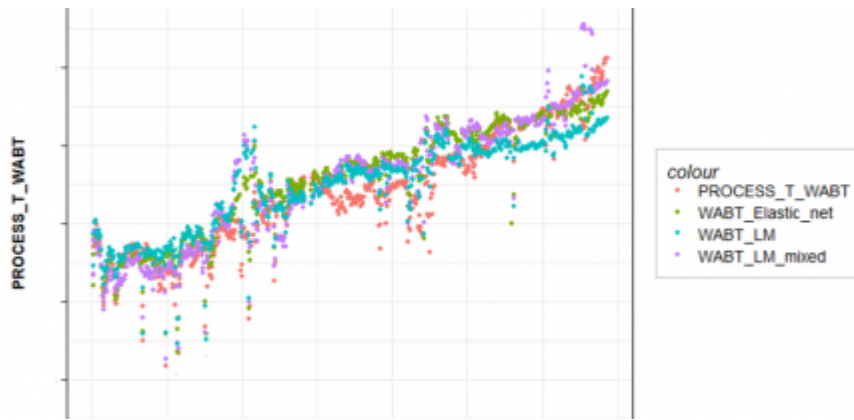
Références :

1. Creton B., **Chemoinformatics at IFP Energies nouvelles: Applications in the Fields of Energy, Transport, and Environment**. Molecular Informatics 2017;36(10).
>> <https://doi.org/10.1002/minf.201700028>
2. Guillemant J, Albrieux F, Lacoue-Nègre M, Pereira de Oliveira L, Joly J-F, Duponchel L., **Chemometric Exploration of APPI(+)-FT-ICR MS Data Sets for a Comprehensive Study of Aromatic Sulfur Compounds in Gas Oils**. Analytical Chemistry 2019;91(18):11785–93.
>> <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b02409>

Contacts scientifiques : lucia.giarracca@ifpen.fr ; benoit.creton@ifpen.fr ; marion.lacoue-negre@ifpen.fr

>> NUMERO_48_DE_SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Les modèles cinétiques font leur apprentissage

Disposer de modèles cinétiques de plus en plus précis et robustes en extrapolation pour prédire certaines propriétés^a reste un enjeu majeur des procédés comme l'hydrotraitement et l'hydr

Sciences de l'ingénieur

Mécanique des fluides

Génie chimique et génie des procédés

Modélisation et simulation des systèmes

Mathématiques et informatique

Méthodes numériques et optimisation

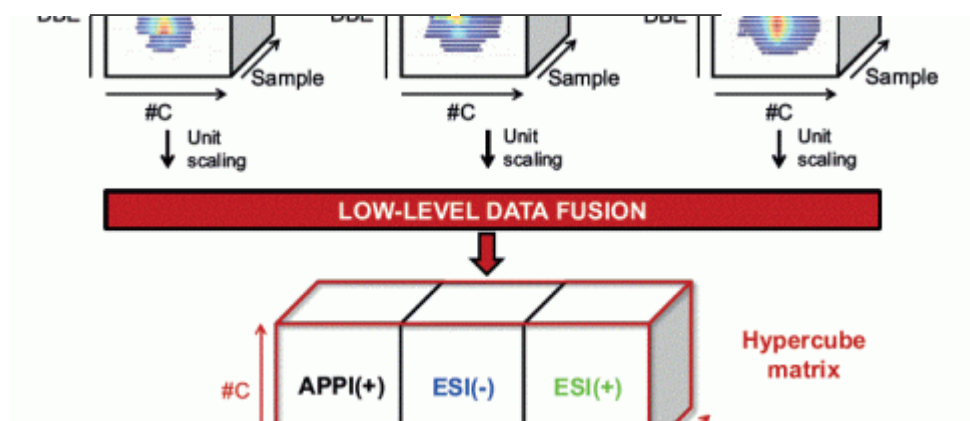


Recherche fondamentale

Actualités

juin 2021

Le prix de thèse de la SFMS décerné à Julie Guillemant



Spectrométrie et chimométrie au service des procédés

La baisse de la qualité des pétroles bruts combinée au durcissement des normes environnementales conduit les raffineurs à modifier leurs procédés pour répondre à la

Analyse et caractérisation

Analyse chimique

Mathématiques et informatique

Traitement du signal / Science des données

Prédiction de la stabilité à l'oxydation de fluides par apprentissage machine

Dans les procédés catalytiques, une phase active est nécessaire pour accélérer la transformation des molécules du fluide traité. Cet agent catalytique est la plupart du temps déposé sur un support poreux doté d'une surface interne importante, permettant d'accueillir un grand nombre de sites actifs dans un faible volume. Cependant, outre la quantité et l'activité de la phase active, les performances d'un catalyseur sont aussi déterminées par l'accessibilité des molécules du fluide à ces sites de réaction. Améliorer les performances du catalyseur passe donc par une bonne description de la diffusion moléculaire effective au sein du support poreux, ce qui nécessite de mieux connaître la topologie interne de ce dernier.

Caractériser la porosité d'un matériau est habituellement réalisé par une technique d'adsorption et de désorption d'azote, méthode qui ne fournit toutefois que des informations indirectes sur la topologie et l'architecture du support poreux. Une représentation *in silico* de ce matériau peut cependant être obtenue en créant un jumeau numérique à l'aide d'un réseau de pores. Cet équivalent numérique constitue alors un modèle d'un grand intérêt pour comprendre comment les propriétés texturales et la topologie du réseau influencent la diffusion des molécules à travers la porosité^a.

Afin d'élaborer ce modèle, des algorithmes ont été développés pour créer un réseau tridimensionnel de pores cylindriques interconnectés, dont les caractéristiques sont obtenues par échantillonnage Monte Carlo de distributions paramétrées [1]. À partir du réseau ainsi créé, il est possible de simuler numériquement les courbes d'adsorption et de désorption d'azote ou de porosimétrie par intrusion de mercure en utilisant des algorithmes dédiés, basés sur la théorie de la percolation par invasion. L'ajustement des paramètres du modèle s'effectue ensuite par le calage de ces données simulées sur les mesures expérimentales, ce qui permet d'adapter le réseau de pores à la structure de différents solides réels.

La validation du jumeau numérique ainsi obtenu a été effectuée par le calcul de son facteur de tortuosité, à l'aide de simulations de diffusion d'un traceur dans le réseau de pores. La comparaison au facteur de tortuosité expérimental, mesuré par RMN à gradient de champ pulsé sur un échantillon physique, a permis de valider l'approche [2].

En résumé, la représentation détaillée d'une structure poreuse, que les outils numériques permettent d'obtenir en réexploitant des données expérimentales communément disponibles, permet d'en extraire à moindre coût les informations topologiques. Dans le cas d'un support de catalyseur, cela permet de reproduire les chemins tortueux que les molécules doivent suivre afin d'atteindre la phase active. L'utilisation de ce type de modèle permettra à terme d'orienter la recherche vers des matériaux optimisés du point de vue de leur porosité, à l'aide de simulations de diffusion-réaction pour différents systèmes réactionnels.



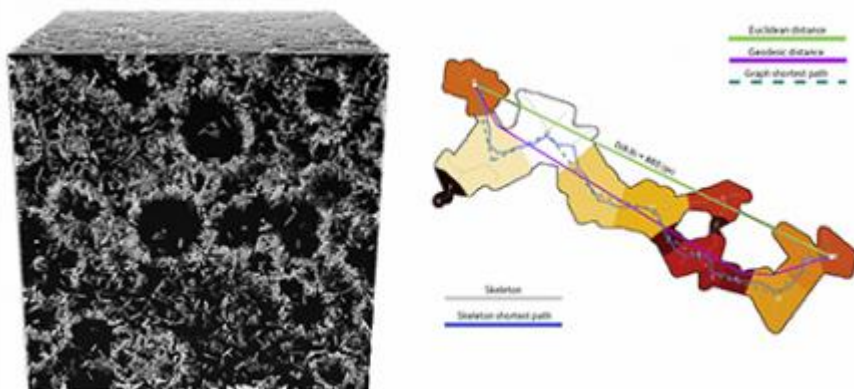
Figure : Volume élémentaire représentatif du jumeau numérique d'une alumine réelle.

a- Ces travaux ont été conduits dans le cadre de la thèse de Gabriel Alejandro Ledezma Lopez intitulée « *Suitable Representations of Gamma Alumina Porous Structures by Computational Modeling* », dirigée par Christian Jallut de l'université Claude Bernard Lyon 1.

Références :

1. G.A. Ledezma Lopez, J.J. Verstraete, L. Sorbier, D. Leinekugel-Le-Cocq, E. Jolimaitre, C. Jallut, **Computational Characterization of a Pore Network Model by Using a Fast Nitrogen Porosimetry Simulation**, Computer Aided Chemical Engineering, 2021, vol. 50, pp. 1111-1116.
>> DOI: [10.1016/B978-0-323-88506-5.50171-6](https://doi.org/10.1016/B978-0-323-88506-5.50171-6)
2. G.A. Ledezma Lopez, J.J. Verstraete, L. Sorbier, A. Glowska, D. Leinekugel-Le-Cocq, E. Jolimaitre, C. Jallut, **Generation of γ -Alumina Digital Twins Using a Nitrogen Porosimetry Simulation**, Industrial & Engineering Chemistry Research, 2021, vol. 60, n° 46, pp. 16728-16738.
>> DOI: [10.1021/acs.iecr.1c02849](https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c02849)

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Conception numérique axée sur l'analyse de microstructures multi-échelles de matériaux poreux

La conception de matériaux poreux performants est un enjeu majeur pour l'efficacité énergétique des procédés industriels : en catalyse, biocatalyse ou encore pour les opérations de séparation et de purification. Pour de telles applications, ces matériaux tirent leurs propriétés d'intérêt de leur microstructure particulière, comportant une grande quantité d'espaces vides organisés et connectés à l'échelle du nanomètre. IFPEN et Saint Gobain Research Provence (SGRP) se sont associés afin de se doter d'un outil facilitant à terme la mise au point de matériaux poreux optimisés en fonction d'usages donnés.

Analyse et caractérisation

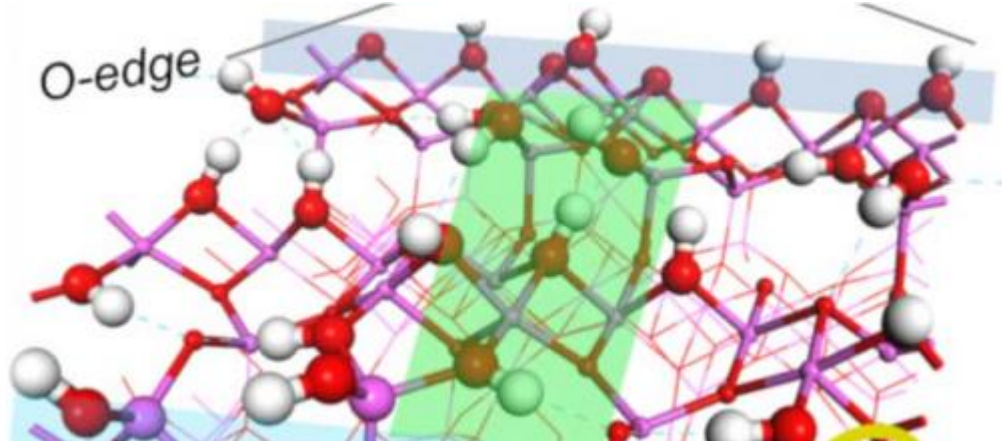
Analyse structurale et imagerie

Chimie physique

Science des surfaces, des interfaces et des matériaux

Mathématiques et informatique

Traitement du signal / Science des données



Recherche fondamentale

Actualités

mai 2020

Spectroscopie et calcul quantique lèvent le voile sur les secrets des supports en alumine

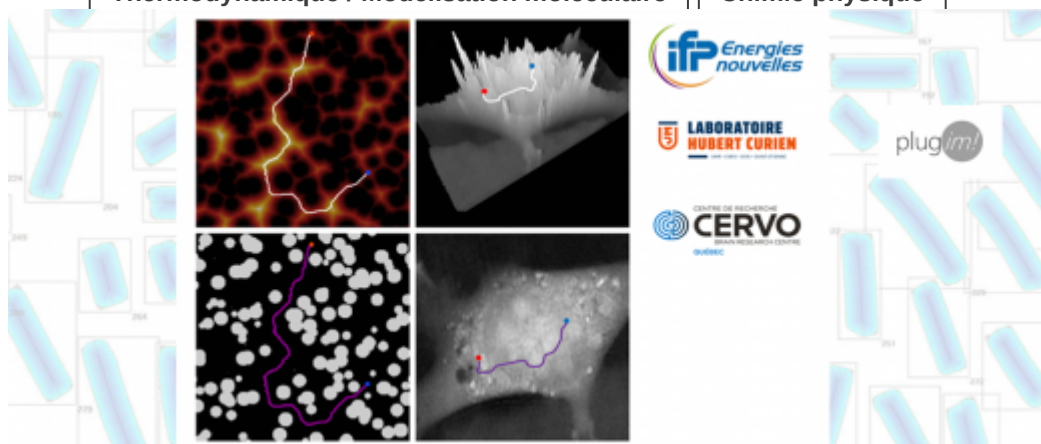
Sciences chimiques

Cinétique de la catalyse et des réactions

Sciences physiques

Thermodynamique / Modélisation moléculaire

Chimie physique



Recherche fondamentale

Actualités

décembre 2019

Nouveaux descripteurs de microstructures poreuses par tortuosité et accessibilité

Géosciences

Pétrophysique et transferts en milieux poreux

Analyse et caractérisation

Analyse structurale et imagerie

Mathématiques et informatique

Traitement du signal / Science des données

Diffusion dans les catalyseurs : un chemin souvent tortueux !

La très grande majorité des raffineries de pétrole est dotée d'une unité de reformage catalytique qui remplit essentiellement trois fonctions : produire des coupes pétrolières à haut indice d'octane, servant de base à la production d'essences (appelées reformats), produire des coupes riches en aromatiques à moins de 10 atomes de carbone, servant à l'industrie chimique, ainsi que générer du dihydrogène, notamment utilisé dans les unités d'hydrotraitement et d'hydrocraquage.

Pour les unités de reformage de naphta^a, un lien étroit mais non rationnalisé unit la distribution des produits en sortie de procédé, et donc la sélectivité, à la formulation de la phase active du catalyseur. Une solution envisagée pour mieux décrire ce lien consiste à élaborer des modèles cinétiques capables d'intégrer certaines propriétés physico-chimiques du catalyseur (les descripteurs catalytiques) en tant que paramètres d'entrée.

L'intégration de ces descripteurs catalytiques dans les modèles cinétiques permettrait alors de mieux anticiper l'effet des changements de phase active sur les performances catalytiques des procédés mais aussi de proposer des formulations innovantes permettant de maximiser la sélectivité des catalyseurs.

Pour cela, un travail doctoral^b s'est attaché à décrire les liens entre la sélectivité du catalyseur et sa formulation. Il a été mené sur le cas de la bifonctionnalité du catalyseur (Pt/Al₂O₃-Cl) utilisé pour la réaction de reformage du naphta. Ce cas est complexe car certaines réactions vont se dérouler uniquement sur les sites acides apportés par la présence de Cl, d'autres sur les sites métalliques Pt et d'autres encore nécessitent la présence des deux sites, avec dans ce cas une influence de la distance sur la sélectivité du catalyseur. L'enjeu de ce travail a résidé dans l'identification de descripteurs de sélectivité facilement quantifiables, contrôlables et ajustables.

Une étude cinétique de cette réaction pour le n-heptane a été menée sur 24 catalyseurs, couvrant diverses teneurs en platine et en chlore, et dotés de supports différents, afin de faire varier les descripteurs à la fois des phases acide (teneur en Cl, distance Pt-Cl) et métallique (teneur en Pt). Cette étude expérimentale a été conduite sur chaque catalyseur en recourant à une unité EHD^c. Les constantes cinétiques pour chaque catalyseur ont d'abord été estimées *via* un modèle en lois de puissance puis corrélées aux descripteurs.

Les résultats obtenus apportent un éclairage sur la relation formulation/sélectivité des catalyseurs et mettent en évidence des phénomènes jusqu'alors insoupçonnés quant à l'effet du chlore sur l'activité métallique de particules de platine [1,2]. Des résultats surprenants ont notamment été obtenus concernant la réactivité en hydrogénolyse^d (figure) :

- une activité préférentielle sur un des supports de catalyseur, avec un minimum d'activité aux teneurs intermédiaires en chlore ;
- un lien entre l'activité et la teneur en chlore.

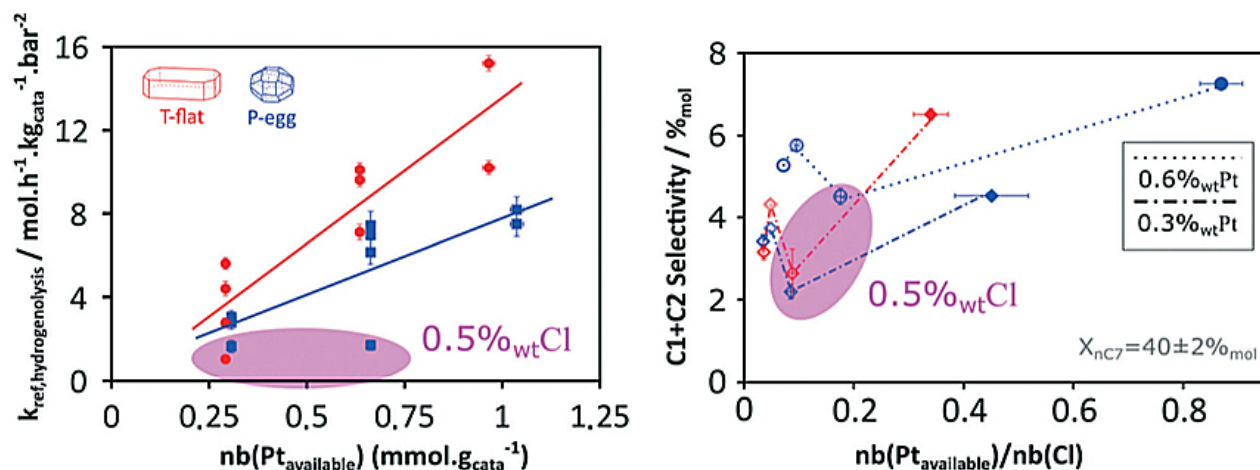


Figure : Effet du support et de l'inhibition du chlore, aux teneurs intermédiaires (0.5%wt) sur la constante cinétique d'hydrogénolyse (gauche) et sur la sélectivité (droite).

Grâce au couplage de la démarche de modélisation avec de l'expérimentation à haut débit et l'emploi de méthodes de caractérisation sophistiquées (RMN protons, dosages H_2/O_2 , HR-TEM, calculs *ab initio* et XAS), ce travail a permis de faire un grand pas vers l'élaboration des modèles cinétiques de reformage. Ces modèles intègrent comme données d'entrée des descripteurs catalytiques. Ce travail a également permis de mettre en évidence des comportements inattendus qui seront exploités comme pistes d'innovation dans le développement de nouveaux catalyseurs.

Une extrapolation aux charges réelles du reformage reste à réaliser, ainsi qu'une meilleure caractérisation de la phase acide des catalyseurs, via une réaction modèle adaptée aux supports à acidité modérée.

a- Mélange liquide d'hydrocarbures légers issu de la distillation du pétrole brut

b- Titre de la thèse : « Identification des descripteurs catalytiques de phase active en reformage du n-heptane »

c- Expérimentation à haut débit

d- Réaction chimique par laquelle une liaison covalente carbone-carbone ou carbone-hétéroatome est décomposée par action d'hydrogène

Références :

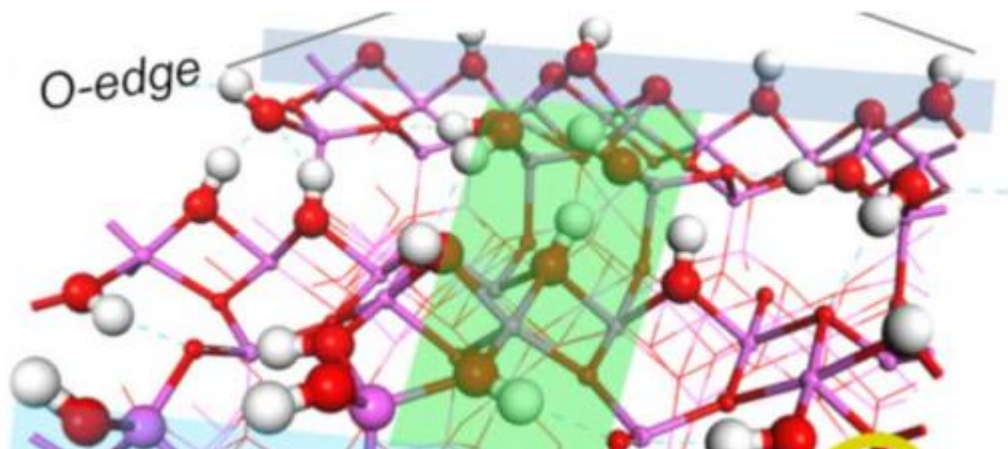
1. O. Said-Aizpuru, A.T.F. Batista, C. Bouchy, V. Petrazzuoli, F. Allain, F. Diehl, D. Farrusseng, F. Morfin, J.-F. Joly, A. Dandeu, **Non Monotonous Product Distribution Dependence on Pt/Al₂O₃-Cl Catalysts Formulation in n-Heptane Reforming**, ChemCatChem 2020, 12. hal-02544492.
>> <https://doi.org/10.1002/cctc.201902260>
2. O. Said-Aizpuru, F. Allain, A. Dandeu, F. Diehl, D. Farrusseng, J.-F. Joly, **Kinetic modelling of Pt/Al₂O₃-Cl catalysts formulation changes in n-heptane reforming**, Reaction Chemistry & Engineering 2021, 6. hal-03249638.

>> <https://doi.org/10.1039/D1RE00073J>

Contacts scientifiques : aurelie.dandeu@ifpen.fr ; florent.allain@ifpen.fr ; fabrice.diehl@ifpen.fr ;
Jean-François Joly

>> NUMÉRO 48 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités

mai 2020

Spectroscopie et calcul quantique lèvent le voile sur les secrets des supports en alumine

Sciences chimiques

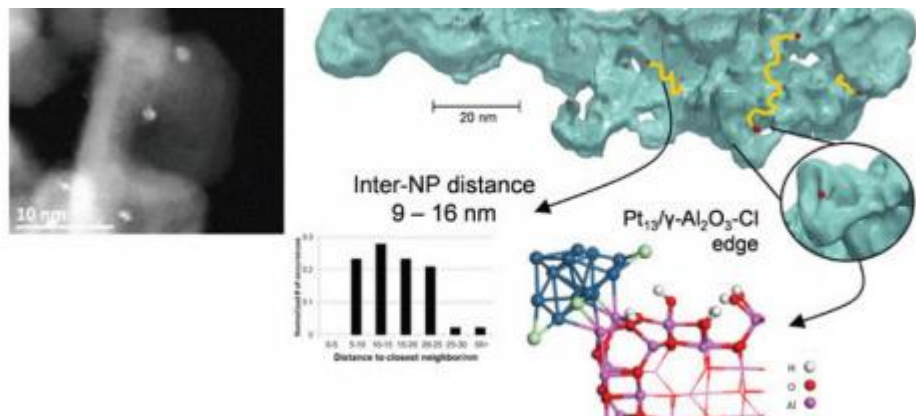
Cinétique de la catalyse et des réactions

Sciences physiques

Thermodynamique / Modélisation moléculaire

Chimie physique

Science des surfaces, des interfaces et des matériaux



La nanoparticule métallique en équilibre sur une arête

Les nanoparticules de platine supportées sur alumine- γ chlorée sont utilisées dans les catalyseurs hétérogènes bifonctionnels qui sont au cœur de nombreux procédés industriels. La localisation des deux types de sites que renferment ces catalyseurs et la distance entre ces sites...

Sciences chimiques	Cinétique de la catalyse et des réactions	Synthèse organique et minérale
Analyse et caractérisation	Analyse structurale et imagerie	Sciences physiques
Thermodynamique / Modélisation moléculaire		



Recherche fondamentale



Actualités

juillet 2019

Les doctorants d'IFPEN à l'honneur !

Identification des descripteurs catalytiques de phase active en reformage

Dans le cadre d'une démarche générale de réduction des émissions produites par le secteur des transports, en particulier routiers, IFPEN s'intéresse à une voie complémentaire à l'électrification des véhicules : l'emploi de motorisations à hydrogène. Toutefois, l'utilisation de l'hydrogène dans des moteurs à combustion interne requiert au préalable une compréhension approfondie de différents phénomènes, du fait par exemple des interactions entre ce combustible et l'air. Un tel objectif nécessite de recourir à des outils de simulation avancés de mécanique des fluides réactifs en conditions turbulentes, ainsi qu'à des méthodes numériques dédiées permettant d'exploiter pleinement les résultats obtenus.

Dans ce contexte, la simulation aux grandes échelles (*Large Eddy Simulation* – LES) permet de reproduire la turbulence de manière réaliste, grâce à une description détaillée des tourbillons et tout particulièrement des phénomènes acycliques [1]. Cependant, l'accès à cette information instationnaire n'est pas immédiat ; il nécessite des outils adaptés, capables d'identifier deux types de mouvements pouvant être à l'origine des variabilités cycle-à-cycle observées dans un moteur : le mouvement d'ensemble de l'écoulement et celui, fluctuant, associé à la turbulence.

La méthode déployée à cette fin a été l'EMD (*Empirical Mode Decomposition*), qui permet d'isoler efficacement les composantes basse fréquence et haute fréquence d'un signal. Initialement développée en 1D, elle a été étendue en 2D pour les applications moteur [2], puis en 3D dans le cadre d'un travail de thèse [3]. Ses avantages sont de n'utiliser pour les calculs qu'un seul champ de vitesse, contrairement aux approches plus classiques comme la POD (*Proper Orthogonal Decomposition*), et de ne pas nécessiter de critère pour isoler les deux types de composantes, contrairement aux approches de type ondelette ou filtre Gaussien.

Dès lors, par l'utilisation de l'EMD en 3D, il devient possible de traiter n'importe quel champ de vitesse au cours d'un cycle moteur et d'avoir accès à la variabilité des grandes structures tourbillonnaires entre les cycles. Il s'agit là d'un apport majeur pour l'analyse et la compréhension des mécanismes physiques conduisant aux variabilités cycliques de la combustion. En outre, cela permet de définir des descripteurs propres aux composantes hautes et basses fréquences du champ de vitesse, ainsi qu'à leur variabilité (figure). L'impact de différents phénomènes (jets de soupapes, interactions avec les parois, mouvement de tumble^a, injection gazeuse) devient ainsi quantifiable.

Ces travaux ont permis le développement d'une technique innovante pour définir de nouveaux descripteurs de l'écoulement turbulent dans des situations fortement instationnaires, tel que rencontré dans les moteurs à hydrogène. Cette technique ouvre la voie à des analyses encore plus poussées de l'aérodynamique turbulente, en vue d'identifier des mécanismes à l'origine de certains phénomènes indésirables (bruit, émissions, etc.) affectant d'autres dispositifs de conversion d'énergie, comme par exemple les machines électriques ou encore les éoliennes.

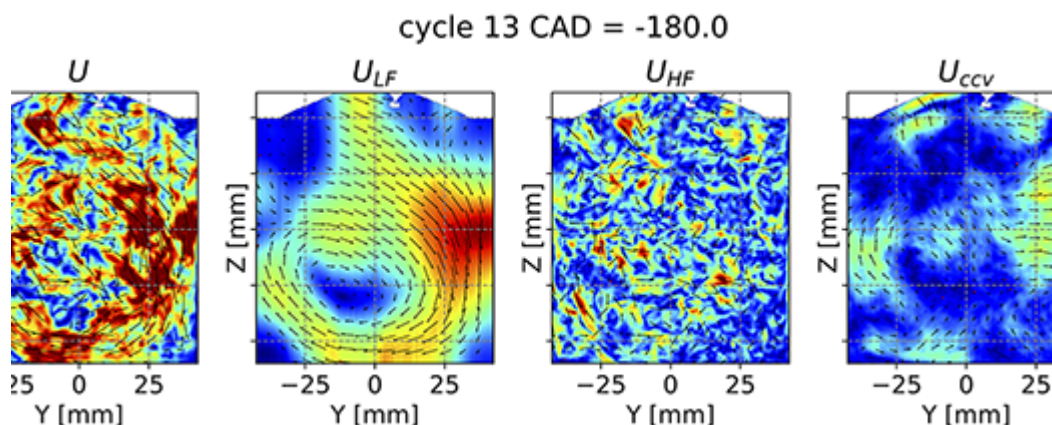


Figure : Décomposition par EMD d'un champ de vitesse turbulent issu d'un calcul LES (coupe 2D). De gauche à droite : le champ de vitesse instantané U, sa composante basse fréquence ULF, sa composante haute fréquence UHF, la variabilité de la vitesse par rapport à la moyenne d'ensemble UCCV.

a- Mouvement aérodynamique de rotation autour d'un axe perpendiculaire à l'axe de déplacement du piston

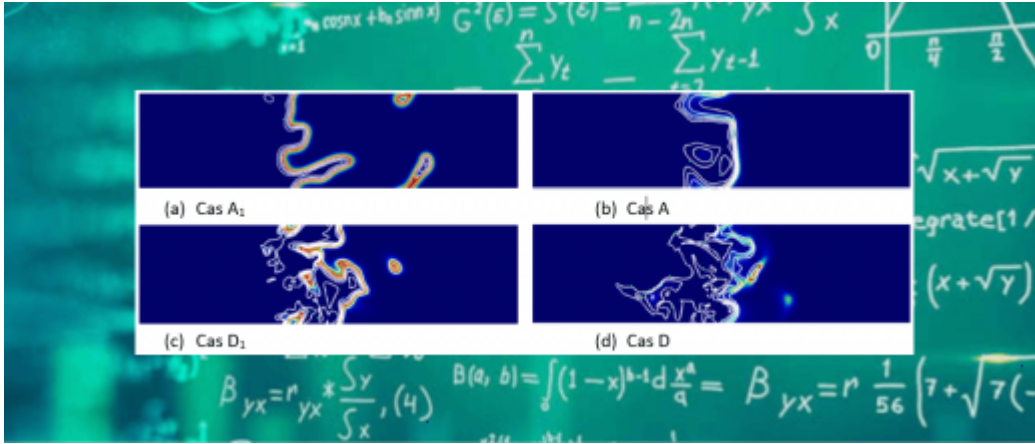
Références :

1. Maio, Giampaolo; Ding, Zhihao; Truffin Karine; Colin Olivier; Benoit Olivier; Jay Stéphane (2022), **ECFM-LES modelling with AMR for the CCV prediction and analysis in lean-burn conditions**. In: Science and Technology for Energy Transition. Submitted.
2. Sadeghi, Mehdi; Truffin, Karine; Peterson, Brian; Böhm, Benjamin; Jay, Stéphane (2021), **Development and Application of Bivariate 2D-EMD for the Analysis of Instantaneous Flow Structures and Cycle-to-Cycle Variations of In-cylinder Flow**. In: Flow, Turbulence and Combustion, vol. 106, n° 1, pp. 231–259.
>> [DOI: 10.1007/s10494-020-00197-z](https://doi.org/10.1007/s10494-020-00197-z)
3. Zhihao Ding, **Méthodologies d'analyse de l'aérodynamique interne moteur**, Thèse de doctorat, université d'Orléans, 2022.
4. Ding Zhihao, Truffin Karine, Jay Stéphane, Schmidt Marius, Foucher Fabrice and Borée Jacques, **On the use of LES and 3D EMD for analyzing cycle to cycle variations of in-cylinder tumbling flow**, submitted to Flow, Turbulence and Combustion.

Contacts scientifiques : karine.truffin@ifpen.fr ; olivier.laget@ifpen.fr ; Stéphane Jay

>> [NUMERO 48 DE SCIENCE@IFPEN](mailto:NUMERO_48_DE_SCIENCE@IFPEN)

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale



Actualités

mai 2021

Modélisation de la combustion à haut Karlovitz dans les moteurs à allumage commandé



Innovation et industrie



Actualités

février 2021

IFPEN mise sur la mobilité hydrogène

Communiqués de presse

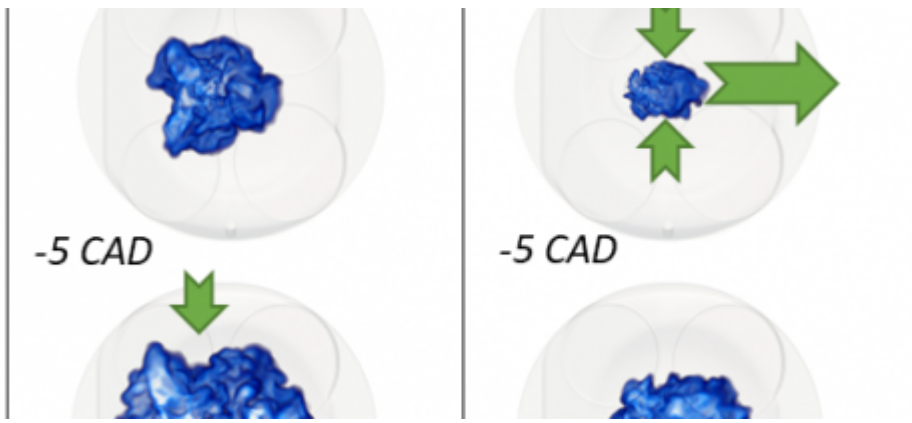
Énergies renouvelables

Hydrogène

Mobilité durable

Mobilité électrifiée

Motorisations thermiques



Simulation des écoulements réactifs multiphasiques : développements et applications dans le domaine de la combustion (HDR 2015)

Le domaine scientifique concerné par mes travaux d'HDR est celui de la modélisation numérique 3D de la combustion diphasique, associant des travaux sur la combustion turbulente et la préparat

Sciences de l'ingénieur	Mécanique des fluides	Modélisation et simulation des systèmes
Mathématiques et informatique	Conception de logiciels	

Une meilleure description des écoulements turbulents pour les motorisations hydrogène

Les systèmes sédimentaires côtiers évoluent sous l'effet des interactions entre d'une part les processus hydroclimatiques qui se produisent au niveau des bassins versants, et d'autre part les processus marins côtiers qui remodelent le trait de côte. L'évolution de ces environnements est naturellement contrôlée par le climat, à différentes échelles de temps (de la dizaine d'années au millénaire), à travers les variations de flux sédimentaires et l'érosion, qui modifient le relief. Un autre facteur contrôlant l'évolution géomorphologique, mais plus récent, a un impact extrêmement fort sur l'évolution de ces systèmes : l'activité humaine. Celle-ci a considérablement modifié le milieu naturel en le façonnant de telle manière que des problèmes de gestion des ressources (aquifères) et d'aménagement du territoire (instabilité des berges, gestion des crues, etc.) se multiplient.

Pour prédire l'impact des différents scénarios de changement environnementaux, et ainsi permettre de mettre en place des politiques locales adaptées, il est essentiel de disposer d'outils de modélisation capables d'intégrer ces différents aspects. Ceci passe par le développement de modèles numériques capables de décrire les facteurs de modification du milieu naturel. De tels modèles doivent alors être paramétrés, et le principal défi pour cela est de quantifier les différents forçages et leurs conséquences sur l'environnement aux différentes échelles de temps.

Le delta du Rhône, et plus particulièrement son évolution depuis la glaciation quaternaire, est le laboratoire idéal pour étudier les interactions homme/milieu et leurs impacts sur l'environnement. L'évolution stratigraphique du delta du Rhône est en effet très bien documentée à travers de nombreuses archives sédimentaires accessibles à la fois sur la plaine deltaïque et dans la partie marine du delta, ainsi que dans le bassin versant. L'interprétation numérique de cartes anciennes [1-3] et de données satellitaires permet par ailleurs de retracer l'évolution de l'occupation des sols, que l'on traduit ensuite en potentiel d'érosion et en flux de particules transportées vers le delta. L'exploitation de ces différentes données (figure) permettra de calibrer, à l'aide du logiciel DionisosFlowTM, une modélisation stratigraphique de l'évolution passée du delta. Sur cette base, des scénarios prédictifs de l'évolution du système deltaïque pourront être proposés.

Cette approche, qui vise à corrélérer l'évolution du bassin versant du Rhône à la dynamique sédimentaire du delta, est mise en œuvre dans le cadre d'une thèse^a en collaboration avec l'université Lumière Lyon 2 et l'Observatoire des Sédiments du Rhône (OSR).

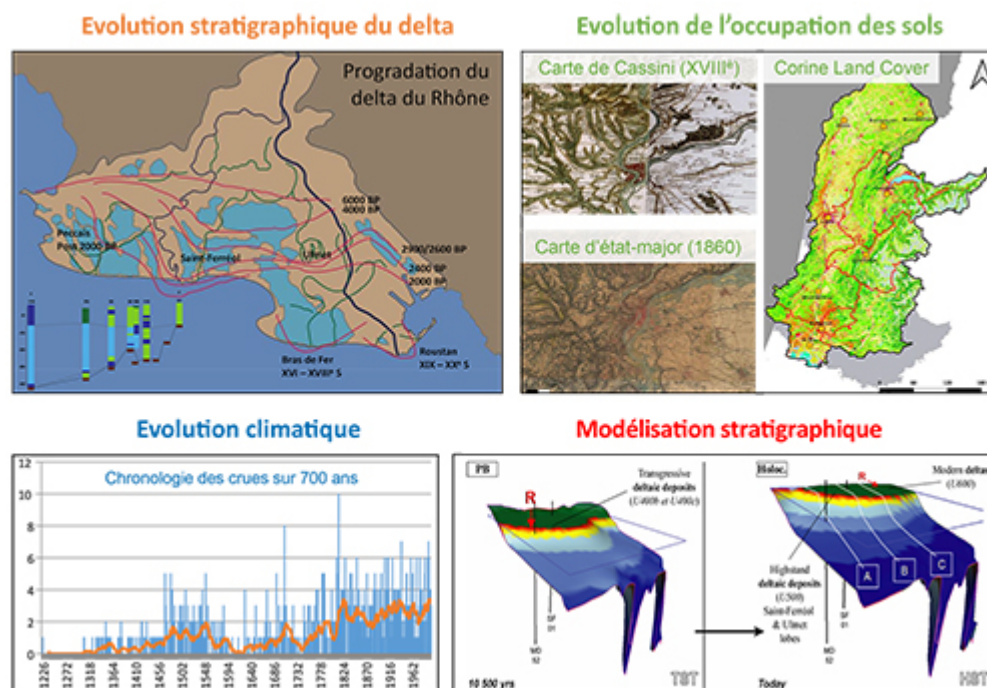


Figure : Stratégie d'intégration :

- 1- des informations sédimentaires du delta,
- 2- des volumes de sédiments érodés dans le bassin versant (indirectement quantifiés à partir de l'évolution de l'occupation des sols),
- 3- de l'évolution climatique, afin de
- 4- calibrer une approche de modélisation stratigraphique.

a- Titre de la thèse : « Impact des paramètres hydroclimatiques et anthropiques sur la dynamique sédimentaire. Système deltaïque du Rhône à la transition Holocène-Anthropocène »

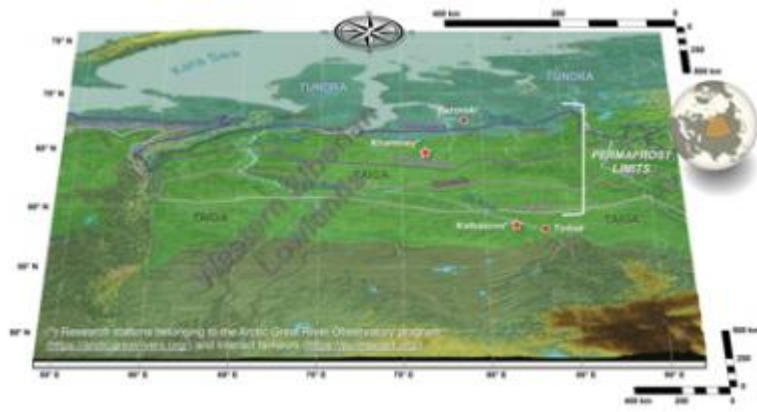
Références :

1. Martinez, T., Hammoumi, A., Ducret, G., Moreau, M., Berger, J.F., Deschamps, R., 2022. **Semantic multi-class segmentation of the Cassini land use map (XVIIIth c.): the first step of a geomorphological comparative studies.** Article soumis à Computer geosciences
2. Martinez, T., Deschamps, R., Ducret, G., Berger, J.F., Hammoumi, A., Moreau, M., Jouet, G., Piégay, H., Vella, C., 2022. **Fluvial geomorphology, sedimentology and cartography supporting spatio-temporal modelling of the large Rhodanian catchment area.** Communication à congrès Quaternaire 13, Strasbourg 14-18 mars 2022
3. Martinez, T., Hammoumi, A., Ducret, G., Moreau, M., Berger, J.F., Deschamps, R., 2022. **Inputs and application of an automated multi-class segmentation of the Cassini land use map (XVIIIth c.) to the understanding of landscape and river dynamics at the end of the LIA.** Abstract étendu à IS Rivers congress, Lyon 4-8 juillet 2022

Contact scientifique : remy.deschamps@ifpen.fr

>> NUMERO_48_DE_SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Changement global, impact sur les paysages et la ressource en eau

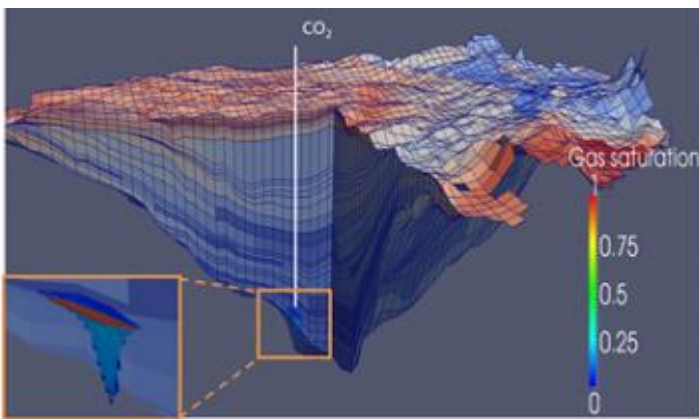
L'impact du changement climatique et des activités anthropiques sur l'évolution des paysages et des ressources en eau constitue aujourd'hui un enjeu majeur. Sa prévision nécessite de disposer d'outils dédiés capables d'évaluer à un horizon de 100 ans les conséquences de différents scénarios sur les bassins versants et les eaux souterraines. IFPEN développe à cette fin des approches de modélisation des phénomènes d'érosion-transport-dépôt couplés aux écoulements de surface et de subsurface...

Géosciences

Géologie - Sédimentologie

Géochimie

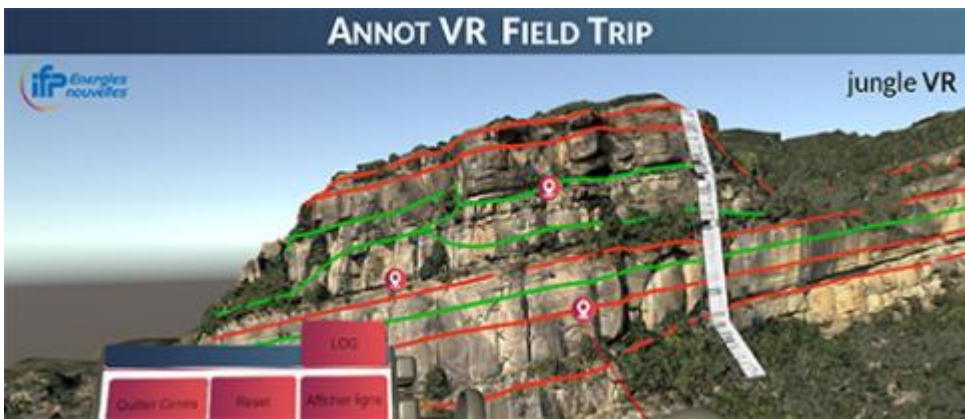
Pétrophysique et transferts en milieux poreux



La modélisation du sous-sol, étape essentielle pour la transition énergétique

Afin de répondre aux enjeux de la transition énergétique, le sous-sol a un rôle à jouer, à la fois pour fournir des ressources et pour offrir des solutions de stockage (...). Les modèles numériques peuvent aider à mieux comprendre le sous-sol pour le gérer durablement et l'utiliser de manière optimale. Développés depuis de nombreuses années à IFPEN, initialement pour l'industrie pétrolière, de tels modèles couvrent des échelles qui s'étendent du bassin sédimentaire au réservoir...

Géosciences	Géologie - Sédimentologie	Géochimie	Géostatistique - Modélisation géologique
Géomécanique	Pétrophysique et transferts en milieux poreux	Mathématiques et informatique	
Méthodes numériques et optimisation			



Géopatrimoine et géodiversité accessibles à tous grâce au numérique

Apparues dans les années 1990, les notions de géopatrimoine et de géodiversité reçoivent une attention grandissante de la part des communautés académiques, des organisations internationales et des pouvoirs publics (...). C'est dans ce contexte qu'IFPEN a signé en 2020 un accord de partenariat avec l'UNESCO, dont l'un des objectifs est le partage d'outils numériques facilitant la promotion du géopatrimoine et de la géodiversité auprès du grand public...

Géosciences	Géologie - Sédimentologie	Mathématiques et informatique
Traitement du signal / Science des données	Maillage et visualisation	

Impact des paramètres hydroclimatiques et anthropiques sur la dynamique du delta du Rhône

Numéro 48 de Science@ifpen - spécial "Descripteurs"
30 juin 2022

Lien vers la page web :