

Science@ifpen
N° 49 - Octobre 2022

Rédigé le 10 novembre 2022

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Le contexte de changement climatique et de demande en énergie nécessite d'accélérer les efforts de R&I pour **développer les technologies bas-carbone de la transition énergétique et écologique**.

Ces développements nécessitent une recherche innovante multidisciplinaire se confrontant avec pragmatisme aux réalités industrielles et aux contraintes environnementales.

La recherche menée dans la direction Physico-Chimie et Mécanique appliquées répond à un besoin de transversalité scientifique, impliquant les disciplines complémentaires de ses 5 départements qui permettent d'adresser plusieurs modes de représentation des phénomènes.

Quels que soient les domaines d'application considérés, il est nécessaire d'établir un dialogue entre différentes physiques et ce, à différentes échelles, pour explorer, comprendre, caractériser et modéliser le comportement des matériaux et des structures en environnement ou celui de fluides complexes à la source de nombreux phénomènes impliqués dans les procédés.

L'objectif ambitieux que nous poursuivons est de **connecter le monde discret et moléculaire de la physico-chimie, au monde continu et plus macroscopique de la mécanique ou de la thermodynamique**. Nous nous appuyons pour cela sur un ensemble d'outils expérimentaux et numériques, pertinents aux différentes échelles d'étude, et sur un socle solide de connaissances scientifiques, perpétuellement enrichi par les réseaux académiques et industriels ou au travers de participations à des projets collaboratifs.

C’est avec plaisir que nous vous proposons d’explorer les grandes lignes de cette recherche au travers de quelques exemples récents illustrant les quatre axes de notre politique scientifique : fluides complexes, interactions fluides/solides, systèmes électrochimiques et structures en environnement.

Bonne lecture !



Thierry Bécue
Directeur de la direction Physico-chimie et Mécanique appliquées IFPEN



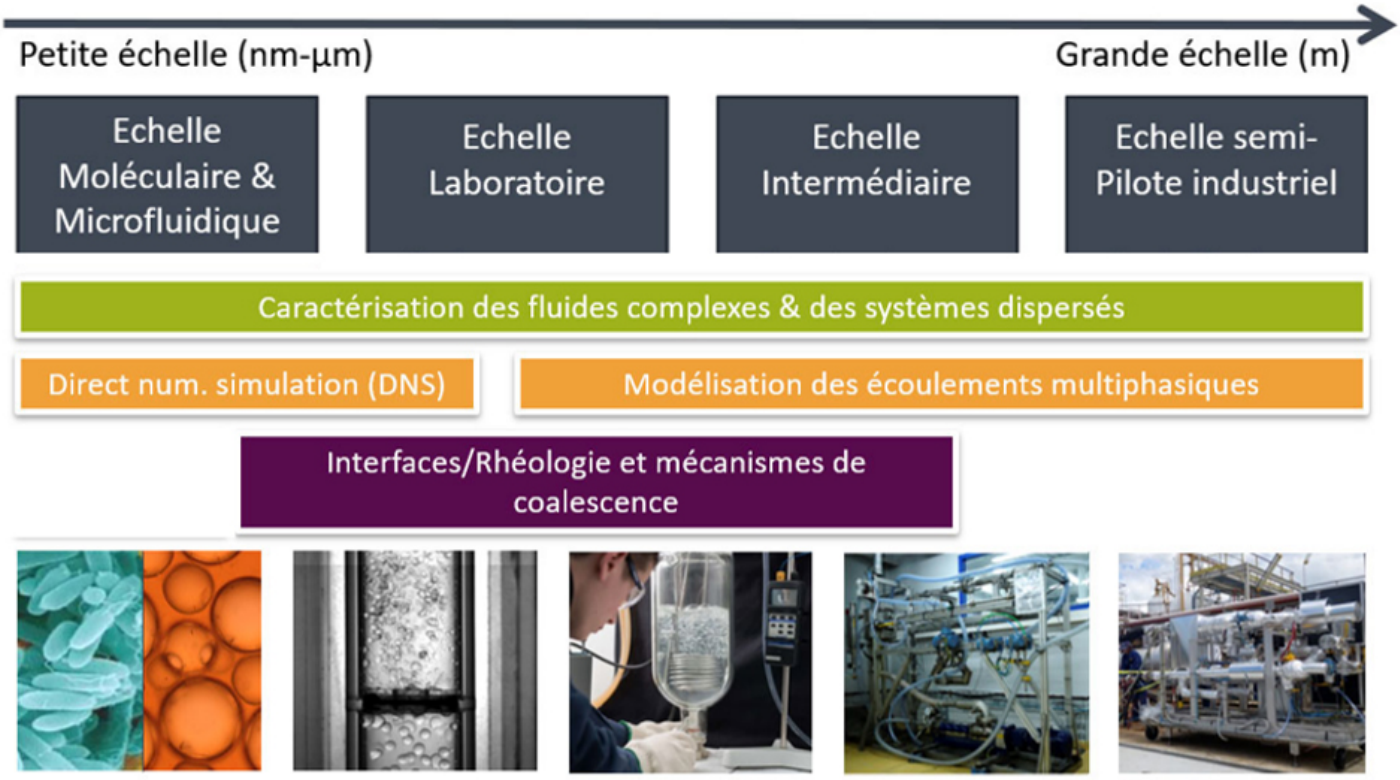
Laurent Cangémi
Adjoint scientifique au directeur de la direction Physico-chimie et Mécanique appliquées IFPEN

LES BRÈVES

De nombreuses applications IFPEN, allant de l'extraction liquide-liquide pour la production de biocarburant au procédé de flottation pour la séparation des microplastiques, mettent en jeu des interactions entre un fluide et le grand nombre d'inclusions (bulles, gouttes) qu'il contient.

La difficulté à décrire ces interactions est liée aux écoulements en tant que tels mais aussi aux phénomènes physiques intervenant à différentes échelles : des forces colloïdales agissant à l'échelle moléculaire jusqu'aux forces hydrodynamiques agissant à l'échelle de l'écoulement.

Or, ces phénomènes ne sont pas indépendants. En effet, la physique des interactions à l'échelle locale de l'interface entre les deux phases (fluide et inclusions) régit le comportement macroscopique de l'écoulement, via les phénomènes de rupture/coalescence, et donc aussi la taille des inclusions. Cette taille influe en retour sur les efforts hydrodynamiques que les inclusions subissent.



Il n'existe pas de théorie qui fasse consensus pour décrire l'ensemble de ces phénomènes. Aussi, chaque nouveau cas d'étude rend nécessaire la réalisation de simulations numériques ou l'acquisition de données expérimentales. Des simulations moléculaires et des expériences fines permettent ainsi de remonter aux propriétés interfaciales d'intérêt, indispensables pour une description précise des phénomènes de rupture/coalescence.

Des travaux récents de ce type ont permis de remonter aux propriétés d'interfaces liquide-liquide et liquide-gaz le long lesquelles des polymères amphiphiles[a] avaient été distribués [1]. En parallèle, des

simulations purement hydrodynamiques ont donné accès au temps de drainage dans des configurations liquide-liquide à force imposée [2]. L'utilisation combinée de ces deux approches est très prometteuse pour ce qui est d'obtenir l'épaisseur critique pour laquelle le film se rompt, en vue de l'injecter dans les lois d'échelles de temps de drainage. Par ailleurs, elle permettra une meilleure détermination de la rhéologie des fluides et des interfaces, dans l'optique d'une intégration directe dans les codes hydrodynamiques, via des lois constitutives.

Une étape supplémentaire pour alimenter les modèles d'ingénierie (de type Euler-Euler) sera de considérer un grand nombre d'inclusions coalescentes et de "moyenner" leur dynamique. Pour dimensionner des procédés industriels, il sera alors possible de ne plus considérer dans les simulations numériques chacune des inclusions avec son mouvement propre mais un fluide "moyenné", d'où un bénéfice en temps de calcul. Le passage des modèles utilisés jusqu'à présent vers ce type d'approche moyennée fait l'objet d'un projet de recherche dans le cadre d'une collaboration avec le CEA.

a- A moitié hydrophiles et à moitié hydrophobes.

Références :

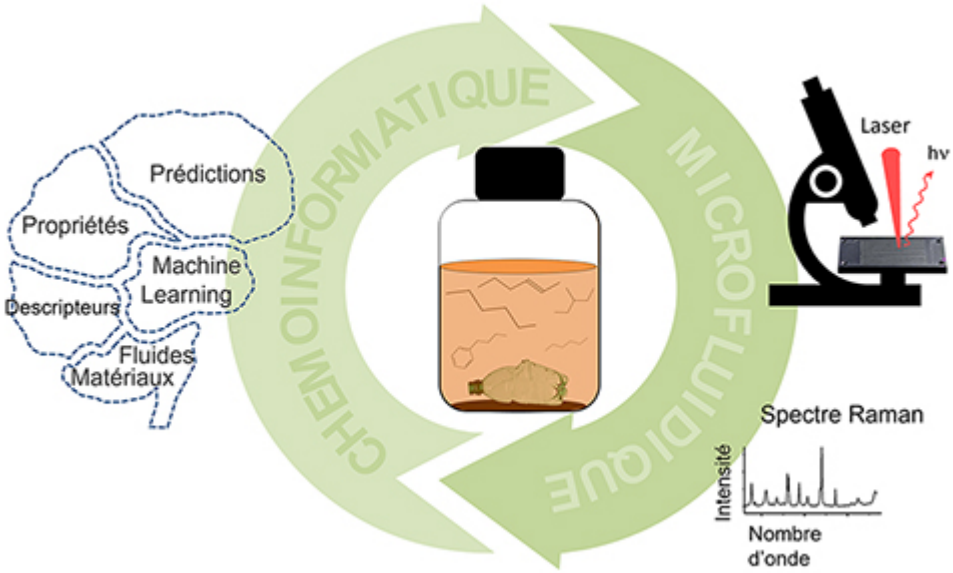
1. I. Henaut, C. Nieto-Draghi, A. Mouret, C. Dalmazzone, V. Lachet. **Rheological behaviour of amphiphilic polymers at liquid/liquid and air/liquid interfaces: Direct comparison of experiments and coarse grain simulations**. GFR 2022, 56ème Congrès du Groupe Français de Rhéologie, Rennes, 26-28 octobre 2022.

2. J.-L. Pierson. **Numerical study of a drop approaching a fluid-fluid interface: from sticking to bouncing**. ICTAM 2021, 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Milano (virtual), 22 to 27 August, 2021.

Contacts scientifiques : isabelle.henaut@ifpen.fr ; jean-lou.pierson@ifpen.fr ; Carlos Nieto-Draghi

>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

Coalescence et propriété interfaciale : du microscopique au macroscopique



Pour de nombreuses applications industrielles, comme le recyclage chimique des plastiques, ou encore pour assurer la compatibilité entre polymères et nouveaux carburants, il est essentiel d'anticiper les interactions entre matériaux et fluides. Leur mise en contact peut en effet engendrer des phénomènes de vieillissement ayant pour conséquence une perte de leurs performances initiales. Ainsi, il est crucial de mieux appréhender ces phénomènes et la cinétique de dégradation qui en résulte afin de permettre une conception au plus juste des équipements.

Le vieillissement des matériaux en présence d'un fluide peut être évalué par prise de masse sur des échantillons de quelques centimètres cubes immergés dans les fluides concernés sur des durées variables. Cette méthode a comme inconvénients majeurs qu'elle requiert des campagnes expérimentales très longues et coûteuses et qu'elle est mal adaptée pour certaines situations : produits ou conditions sensibles (toxicité, dangerosité, conditions extrêmes de température et pression…). Pour pallier ce problème, deux voies sont alors envisageables et déployées de concert à IFPEN : le développement de modèles prédictifs et la réduction d'échelle des expérimentations.

Le premier point fait appel à la Chémoinformatique, dont une des déclinaisons est l'utilisation de l'intelligence artificielle pour prédire des propriétés à partir de données de référence [1]. Son application a d'ores et déjà rendu possible la modélisation de la quantité de fluide pénétrant dans un polymère lors de leur mise en contact prolongée [2]. Afin d'accroître les domaines d'applicabilité de ces modèles (nouveaux couples polymère/fluide, autres gammes de température et de pression…) ou encore leur robustesse, il importe désormais de compléter les bases de données existantes par l'acquisition à la fois massive et ciblée de nouveaux résultats expérimentaux. Pour ce faire, de nouvelles techniques doivent être envisagées.

A cet égard, la Microfluidique élargit le spectre des possibilités expérimentales. Cette technique consiste en l'étude du comportement de fluides et/ou de matériaux dans des dispositifs miniaturisés, tels que des puces, comportant des canaux de quelques dizaines de micromètres de diamètre (Figure 1). Cette réduction d'échelle offre des avantages considérables en termes de coût, de sûreté d'expérimentation et de délai. Les petits volumes mis en jeu réduisent en effet les quantités de matière requises et limitent les risques opératoires. De plus, la méthode est tout naturellement

adaptée à la production « haut débit » de données expérimentales (parallélisation, accélération par augmentation des ratios surface/volume). Par ailleurs, l'association de méthodes non destructives, telles que la spectroscopie Raman, permet l'étude de phénomènes in-situ, y compris dans des conditions sévères du fait que ces puces peuvent fonctionner dans des conditions haute pression-haute température [3].

Tous ces éléments confèrent à la rencontre entre Chémoinformatique et Microfluidique une forme d'évidence pour étudier les interactions entre matériaux et fluides. Plus généralement, leur combinaison ouvre des perspectives intéressantes pour le développement de modèles robustes, c'est-à-dire basés sur des données nombreuses et pertinentes, et capables de prendre en compte aussi bien de nouveaux composés que de nouvelles conditions de pression et de température.

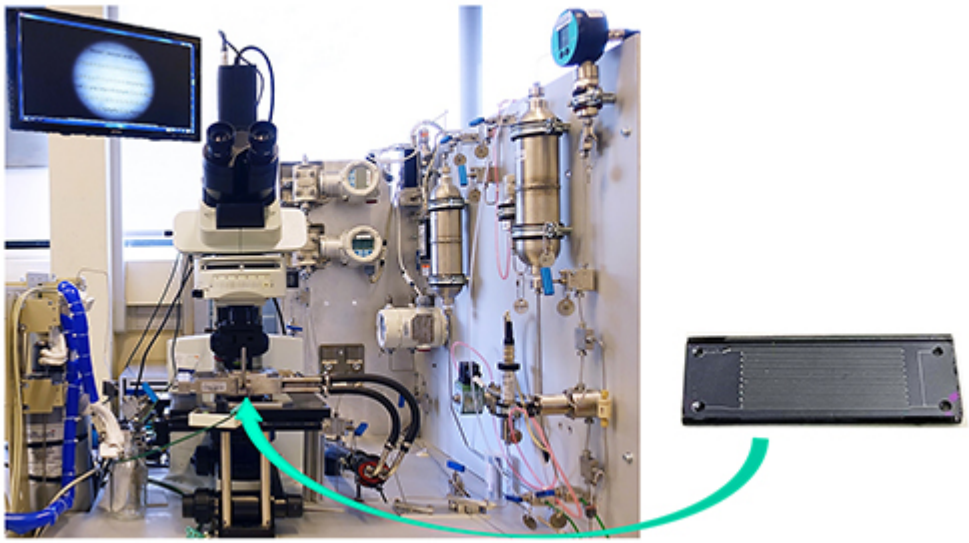


Figure 1. Dispositif expérimental (gauche) et puce microfluidique (droite) haute pression-haute température (100 bars – 300 °C)

Références :

1. Science@ifpen numéro 48, juin 2022
   >> https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/breve/chemoinformatique-et-ses-descripteurs-application-compatibilite-polymeresfluides

2. 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

3. T. Gavoille, N. Pannacci, G. Bergeot, C. Marliere, S. Marre, **Microfluidic approaches for accessing thermophysical properties of fluid systems**, Reaction Chemistry & Engineering 2019, 4(10), 1721-1739.
   >> DOI: 10.1039/C9RE00130A

Contacts scientifiques : benoit.creton@ifpen.fr ; claire.marliere@ifpen.fr

>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

Microfluidique et Chémoinformatique : une forte complémentarité pour étudier la compatibilité matériaux/fluides

De son expérience reconnue dans le développement de solutions pour la production énergétique, IFPEN a hérité une expertise approfondie des matériaux à usage fonctionnel. Cette compétence est aujourd'hui mise au service des nouveaux défis de la transition énergétique, depuis les nouveaux systèmes de batteries jusqu' à la gestion thermique et énergétique des procédés (stockage de l'énergie par air comprimé décarbonation des procédés, etc.) en passant par de nouveaux types de motorisation.

Fonctionnaliser un matériau, c'est-à-dire lui conférer des propriétés maitrisées à partir de sa structure, de sa formulation ou de sa chimie, requiert la mise en œuvre d'approches couplant différentes physiques et différentes échelles.

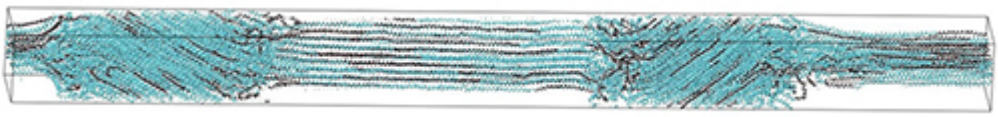
En considérant la croissance des puissances de calcul disponibles pour la simulation numérique, les équipes d'IFPEN ont mis en place depuis plusieurs années une démarche globale de modélisation multi-échelle, dont le but est de faire la jonction entre la compréhension des mécanismes à petite échelle (moléculaires ou microstructuraux) et des approches macroscopiques, thermodynamiques ou mécaniques [1-4]. Cette démarche se déploie selon deux axes complémentaires :

- La simulation moléculaire pour une compréhension des phénomènes physico-chimiques ou des couplages fins avec la mécanique.
- La simulation de microstructures à usage fonctionnel permettant d'optimiser la transfert de masse, la thermique et la mécanique au sein de matériaux à architectures « contrôlées », pour des nouvelles solutions à base d'impression 3D.

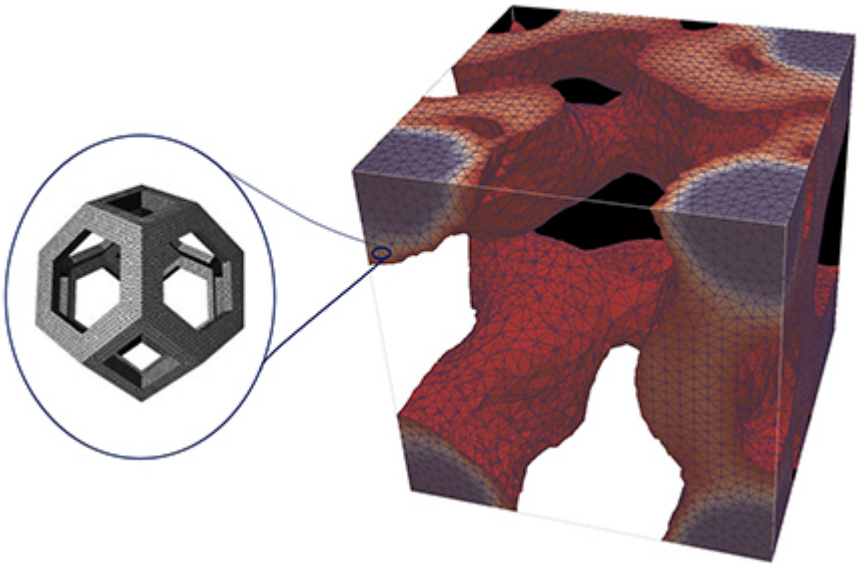
Le déploiement de cette démarche s'est d'abord concrétisé dans la prédiction, à partir de l'échelle moléculaire, des propriétés élastiques de matériaux présentant plusieurs échelles caractéristiques, comme les supports de catalyseur ou les polymères semi-cristallins (figure 1.a) [1], [2] et [4].

Cette méthodologie permettra également d'améliorer la prédiction des propriétés physico-chimiques, comme la solubilité d'espèces dans un matériau polymère et la compréhension des interactions avec certains solvants (recyclage des plastiques), la compréhension de la diffusion d'espèces dans des milieux confinés (zéolites, membranes, etc.), ou à une échelle plus grande, de construire de nouveaux matériaux architecturés par optimisation topologique pour les moteurs électriques, les échangeurs thermiques (Figure 1.b) ou les systèmes de stockage [3].

Figure 1. Exemples de microstructures et de problématiques physiques à différentes échelles.



a) Assemblage moléculaire amorphe/cristal dans un polymère semi-cristallin soumis à de la traction avec apparition de cavitation [1]



b) Microstructure poreuse (à gauche) et mésostructure à densité variable (à droite) obtenue par optimisation topologique d'un problème thermo-poro-mécanique [3].

Références :

1. B. Belin, M. Yiannourakou, V. Lachet, B. Rousseau (2022). **Modeling Method for Semicrystalline Polymers Controlling Aspects of the Morphology at the Molecular Scale for the Study of Mechanical and Physicochemical Properties**. The Journal of Physical Chemistry.
   >> https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.2c04571

2. N. Brusselle, V. Le Corre, L. Cangémi. **Numéro 34 de Science@ifpen - Mécanique appliquée**.
   >> https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/article/numero-34-scienceifpen-mecanique-appliquee

3. G. O. Agyekum. **Shape and topology optimization of Multiphysics Systems**. Thèse de l'Université Paris Cité. Laboratoire Jacques-Louis Lions Paris Sorbonne, 2022.

4. E. Roguet, K. Akhan, N. Brusselle-Dupend, V. Le Corre, M. Sidhom, L. Cangemi, M. Moreaud, G. Clavier, V. Lachet, B. Rousseau, **Investigation of the 3D crystalline network impact on the elastic properties of Semi-Crystalline Polymers from a multi-scale modelling approach** . Computational Materials Science 167, 77–84 (2019).
   >> https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.05.006

Contacts scientifiques : laurent.cangemi@ifpen.fr ; veronique.lachet@ifpen.fr

>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

Les matériaux pour l'énergie, une transition d'échelles pour une transition énergétique

La thermodynamique des électrolytes est un domaine stratégique pour IFPEN car elle intervient dans nombre de ses innovations technologiques, existantes ou en développement.

Citons par exemple :
> **les procédés biologiques**, réalisés dans des environnements aqueux ;
> **les batteries** utilisant des électrolytes organiques ;
> **la géothermie** où les hautes températures et la corrosion sont de réels défis, avec une agressivité du milieu qui est pilotée par son pH et ses concentrations ioniques.

Ces applications sont aujourd'hui rejointes par l'hydrométallurgie, technique qui doit permettre le recyclage de métaux issus de batteries ou des catalyseurs.

Le département thermodynamique mène en parallèle plusieurs actions sur cette thématique de thermodynamique des électrolytes :

- L'animation de la **chaire IFP-School** a pour objectif d'accélérer la recherche permettant de mieux comprendre les phénomènes et de les décrire dans un modèle macroscopique. Elle associe d'autres départements d'IFPEN pour la réalisation de mesures (équilibres de phases, spectroscopie, conductimétrie).

- La participation à un **projet européen ERC**, piloté par le DTU[a], donne accès à des discussions de grande qualité avec des chercheurs de plusieurs grandes universités.

- Le pilotage du **JIP EleTher** permet quant à lui d'aborder avec des partenaires industriels la question du transfert des modèles issus de recherche. Un modèle ne sera en effet utilisé à grande échelle qu'à condition d'être à la fois disponible et convenablement paramétré dans un simulateur commercial. Ce partenariat implique donc une collaboration étroite avec des vendeurs de logiciel.

- L'investissement dans le **GDR Prométhée**, qui réunit 27 laboratoires français, accompagne les nouvelles activités d'IFPEN dans le domaine de l'hydrométallurgie.



a- DTU : Danmarks Tekniske Universitet (Technical University of Denmark)

Contact scientifique : Jean-Charles de Hemptinne

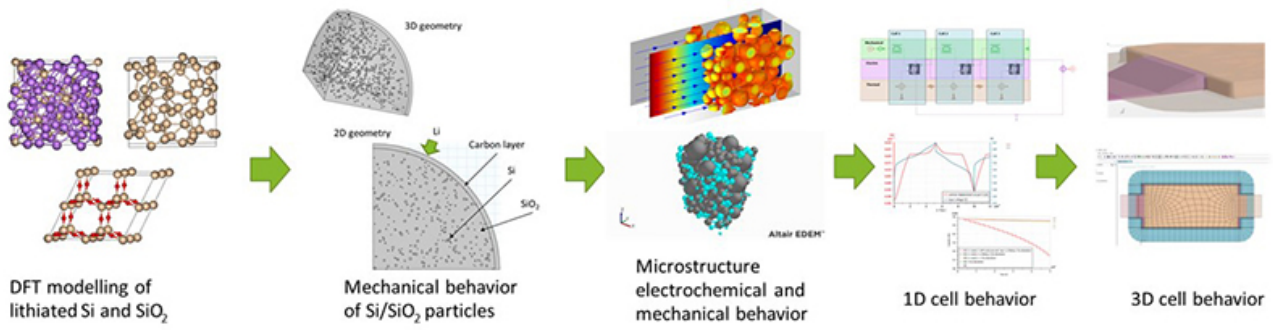
>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

La thermodynamique des électrolytes à IFPEN

Depuis une quinzaine d'années, IFPEN s'emploie à modéliser les batteries conventionnelles à travers des modèles représentant leur fonctionnement nominal (comportement électrique et thermique au cours du fonctionnement normal), en cours de vieillissement [1-2] (évolution des performances liées aux mécanismes de dégradation) et en cas d'emballement thermique (défaillance, usage abusif) [3–5].

Les technologies de batteries, telles que celles à base de lithium, sont en perpétuelle évolution dans le but d'augmenter leur densité d'énergie, d'abaisser leur coût ou d'augmenter la sécurité de leur usage. Dans le même temps, ces évolutions multiples nécessitent une adaptation continuelle de la nature[a] et de la structure[b] des modèles employés pour décrire leur comportement.

L'un des meilleurs exemples de ces évolutions concerne les variations volumiques importantes des matériaux d'électrodes, au cours des cycles de charge et décharge. Celles-ci entraînent des variations des contraintes mécaniques internes et des évolutions des interfaces entre les constituants, avec un impact sur les performances des batteries. C'est le cas des batteries à haute performance dont l'électrode négative comporte du silicium[c] et pour lesquelles cette dimension mécanique doit être ajoutée aux modèles multiphysiques et multi-échelles précédemment développés [2]. C'est ce à quoi s'attachent le projet européen MODALIS[d] (figure), coordonné par IFPEN, et le projet PSPC-Régions[e] Auranode, mené en partenariat avec la société Enwires. La nouvelle génération 4 des batteries au lithium, dite aussi « tout solide »[f], est également concernée par ces évolutions. Cette génération du « tout solide » sera étudiée dans le cadre du projet européen HELENA[g] au sein duquel IFPEN est leader des activités de modélisation.



Approche appliquée dans le cadre du projet MODALIS

L'amélioration des modèles passe ensuite par une meilleure prise en compte des mécanismes aux interfaces électrode/électrolyte dans ces différents systèmes (interface liquide/solide ou solide/solide). L'échelle des réactions à ces interfaces impose le recours à des approches de modélisation moléculaire, ce qui fait l'objet de travaux de thèse en collaboration avec l'ENS Lyon et Stellantis.

Par ailleurs, l'amélioration de la sécurité des nouvelles technologies de batterie s'appuie sur la modélisation des phénomènes pouvant conduire à un emballement et une dégradation du système. Le modèle développé à IFPEN décrit les réactions exothermiques de dégradation des différents composants de la batterie. Il est capable de simuler l'évolution de la température, de la tension, et celle de la pression interne de la cellule durant l'emballement thermique. Il permet également l'étude de la propagation de cet emballement thermique entre cellules voisines dans un pack batterie. Enfin, il est couplé à un modèle de vieillissement, de sorte que l'impact de ce dernier sur la stabilité thermique des batteries est désormais pris en compte. [6].

Pour tous ces développements réalisés par IFPEN, la démarche globale consiste en une approche multiphysique et multi-échelle fondée sur le couplage de l'électrochimie avec des phénomènes diffusionnels, interfaciaux, thermiques et mécaniques. Cette approche est d'ores et déjà déployée pour l'étude d'autres systèmes de stockages d'énergie, comme les batteries à flux, ou encore pour les piles à combustible [7].

a- Electrique, électrochimique, mécanique, chimique
b- Couplé/non couplé, complexe/simplifié
c- Génération 3b (haute capacité / haute tension)
d- MODelling of Advanced LI Storage Systems,
e- Projet de recherche et développement structurant pour la compétitivité
f- Dans laquelle le lithium métallique est employé à l'électrode négative et où l'électrolyte liquide est substitué par un électrolyte solide
g-Halide solid state batteries for electric vehicles and aircrafts

---

Références :

1. Edouard C., Petit M., Bernard J., Forgez C., Revel R. (2015) **Sensitivity Analysis of an Electrochemical Model of Li-ion Batteries and Consequences on the Modeled Aging Mechanisms**, ECS Transactions 66, 9, 37–46.
   >> DOI: 10.1149/06609.0037ecst

2. Petit M., Calas E., Bernard, Julien, Julien (2020) **A simplified electrochemical model for modelling Li-ion batteries comprising blend and bidispersed electrodes for high power applications**, J.Power Sources 479, 228766.
   >> DOI: 10.1016/j.jpowsour.2020.228766

3. Nguyen T.T.D., Abada S., Lecocq A., BERNARD J., Petit M., Marlair G., Grugeon S., Laruelle S. (2019) **Understanding the Thermal Runaway of Ni-Rich Lithium-Ion Batteries**, WEVJ 10, 4, 79.
   >> DOI: 10.3390/wevj10040079

4. Abada S., Petit M., Lecocq A., Marlair G., Sauvant-Moynot V., Huet F. (2018) **Combined experimental and modeling approaches of the thermal runaway of fresh and aged lithium-ion batteries**, Journal of Power Sources 399, 264–273.
   >> DOI: 10.1016/j.jpowsour.2018.07.094

5. Petit M., Abada S., MINGANT R., BERNARD J., DESPREZ P., PERLO P., BIASIOTTO M., INTROZZI R., Lecocq A., Marlair G. (2019) **Demobase project: Numerical simulation for seamless integration of battery pack in light electric vehicle**.
   >> https://zenodo.org/record/3368893

6. IFPEN (2022) IFPEN | **La modélisation pour améliorer la sécurité des batteries lithium-ion**. Available at:
   >> https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/article/modelisation-ameliorer-securite-des-batteries-

lithium-ion

7. Cacciuttolo Q., Petit M., Pasquier D. (2021) **Fast computing flow battery modeling to optimize the choice of electrolytes and operating conditions – application to aqueous organic electrolytes**, Electrochimica Acta 392, 138961.
   >> DOI: 10.1016/j.electacta.2021.138961

Contacts scientifiques : sara.abada@ifpen.fr ; martin.petit@ifpen.fr ; julien.bernard@ifpen.fr

>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

Comportement des batteries : une complexité mieux prise en compte par la modélisation

Les lignes d'ancrage, le plus souvent constituées de câbles en acier au carbone, sont des éléments essentiels pour la stabilité de structures flottantes en mer, comme celles supportant des éoliennes. Pour pallier le risque de rupture en service, des lignes redondantes sont généralement prévues à la conception, ce qui entraîne un surcoût notable. L'enjeu est d'améliorer la fiabilité des câbles pour limiter ces redondances, par une meilleure prédiction de leur durée de vie en fatigue.

La fatigue des câbles acier est un phénomène multi-échelle. Il dépend à grande échelle des variations de tension et de courbure liées aux sollicitations par le vent, les vagues et les courants. A l'échelle métrique, le comportement dépend des frottements entre les fils constituant les câbles (Figure 1). Enfin, à l'échelle millimétrique du contact entre fils, le phénomène dépend du chargement mécanique local et de l'environnement (air, eau de mer, graisse).

La démarche suivie à IFPEN, en collaboration avec le laboratoire LMPS[a] de l'Ecole Normale Supérieure et le laboratoire LTDS[b] de l'Ecole Centrale Lyon, a consisté à remplacer une prédiction actuellement empirique de la tenue en fatigue par une modélisation multi-échelle fondée sur la physique. A l'échelle macroscopique, les zones critiques de la ligne d'ancrage sont déterminées avec une simulation aéro-servo-hydro-élastique[c] de la structure flottante qui tient compte du chargement en vent, vagues et courant marin. On en déduit un chargement, en tension et courbure variables, d'un modèle FEM[d] mésoscopique (dizaine de mètres) du câble qui prédit le glissement et l'état de contraintes entre les fils (Figure 2). A l'échelle du contact entre les fils, la modélisation permet de vérifier le respect d'un critère de *fretting-fatigue*[e] identifié expérimentalement en tenant compte de l'environnement (Figure 3) et qui correspond à la transition glissement partiel/ glissement total[f] .

Les travaux menés ont conduit à des progrès significatifs pour la simulation du comportement des lignes d'ancrage en acier et à une meilleure compréhension du comportement en *fretting-fatigue* des fils qui les constituent.

Sur le premier aspect, à l'échelle mésoscopique, le nouveau modèle FEM permet d'abaisser considérablement le temps de calcul. Des travaux en cours cherchent à poursuivre cette diminution grâce à une réduction de modèle par la méthode PGD-LATIN [3] du LMPS.

Sur le second aspect, en plus de mettre en évidence l'existence d'un glissement critique, les essais de *fretting-fatigue* ont montré l'influence déterminante mais complexe et parfois contre-intuitive du milieu environnant. La graisse a un effet positif mais limité, car elle a du mal à entrer dans le contact. L'eau de mer a deux effets antagonistes : d'un côté elle réduit l'endommagement par son pouvoir lubrifiant, de l'autre elle l'augmente par son action corrosive. Selon le chargement, l'un ou l'autre mécanisme l'emporte (figure 4). Les essais en eau de mer ont été faits dans une cellule aérée, avec contrôle du potentiel électrochimique.

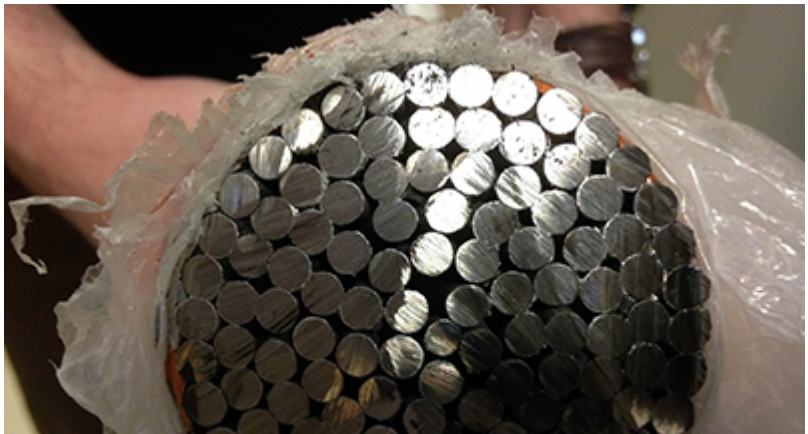


Figure 1 : section d’un câble d’ancrage acier

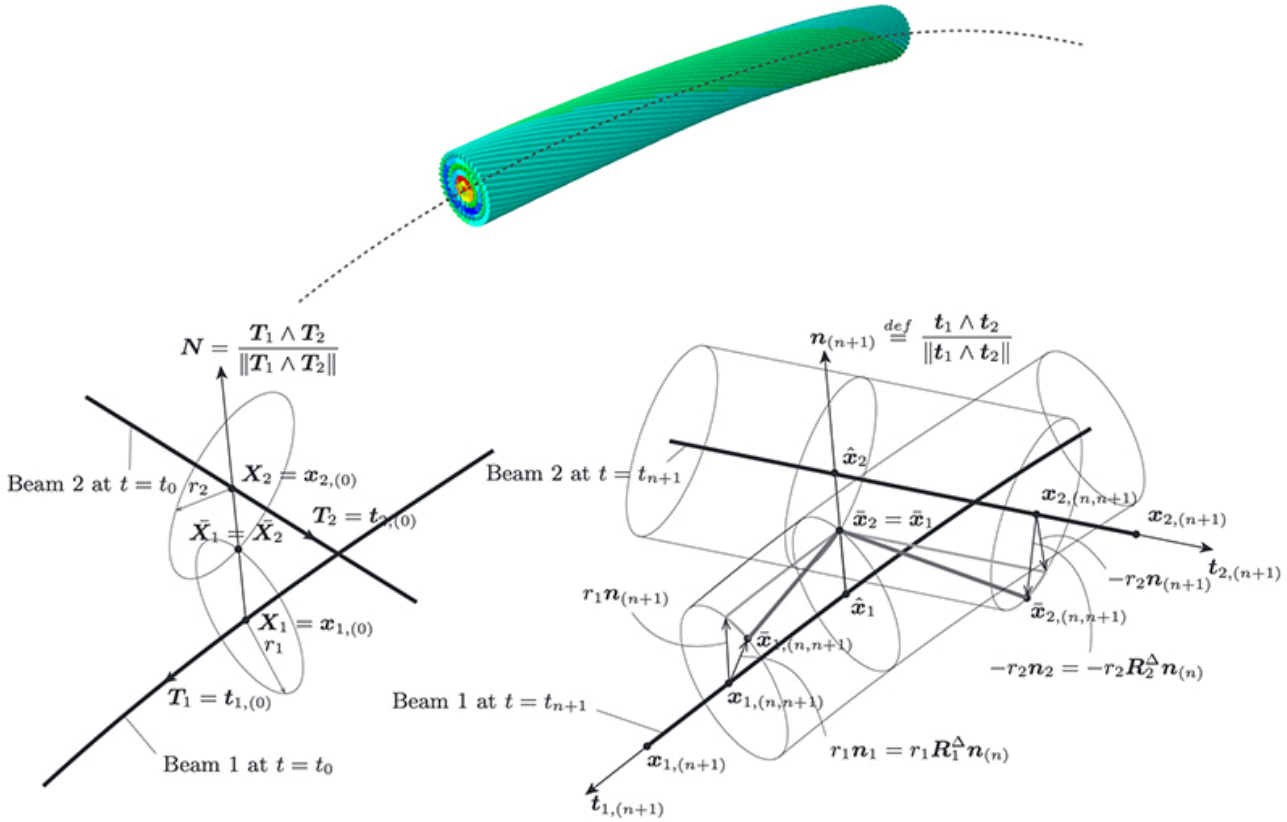


Figure 2 : Modèle éléments finis d’un câble avec contact et frottement [1].

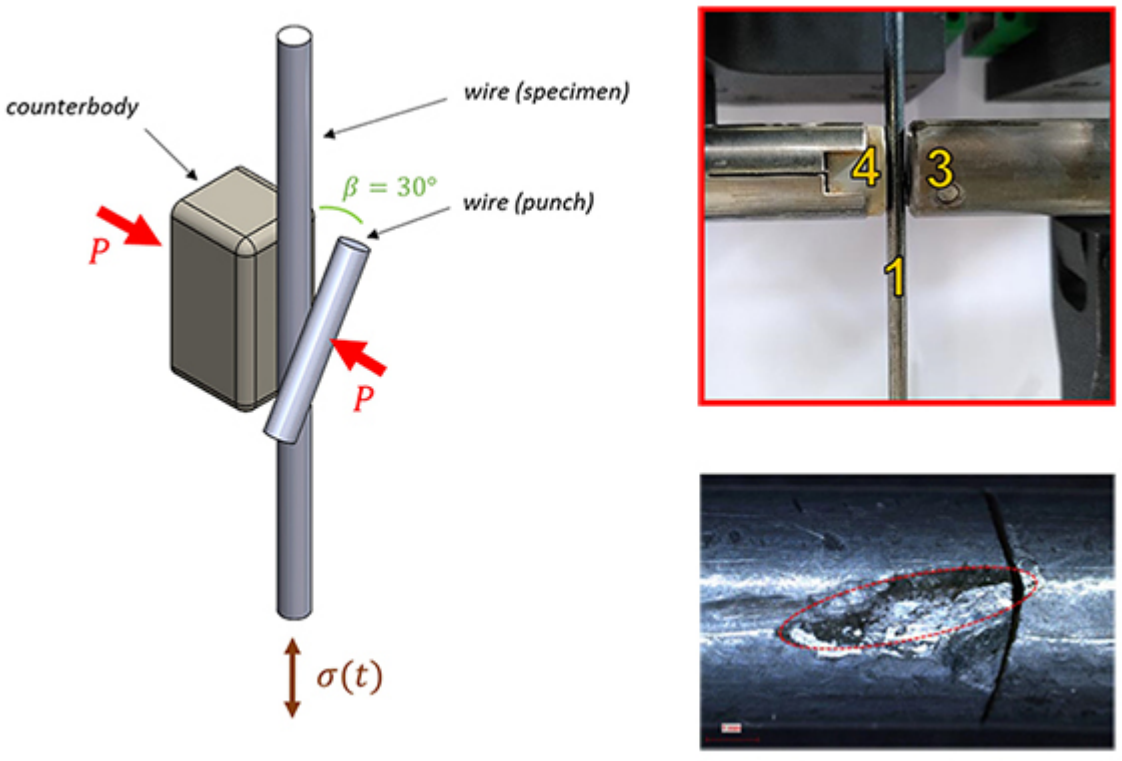


Figure 3 : Essai de fretting-fatigue sur un fil de câble au LTDS [2]

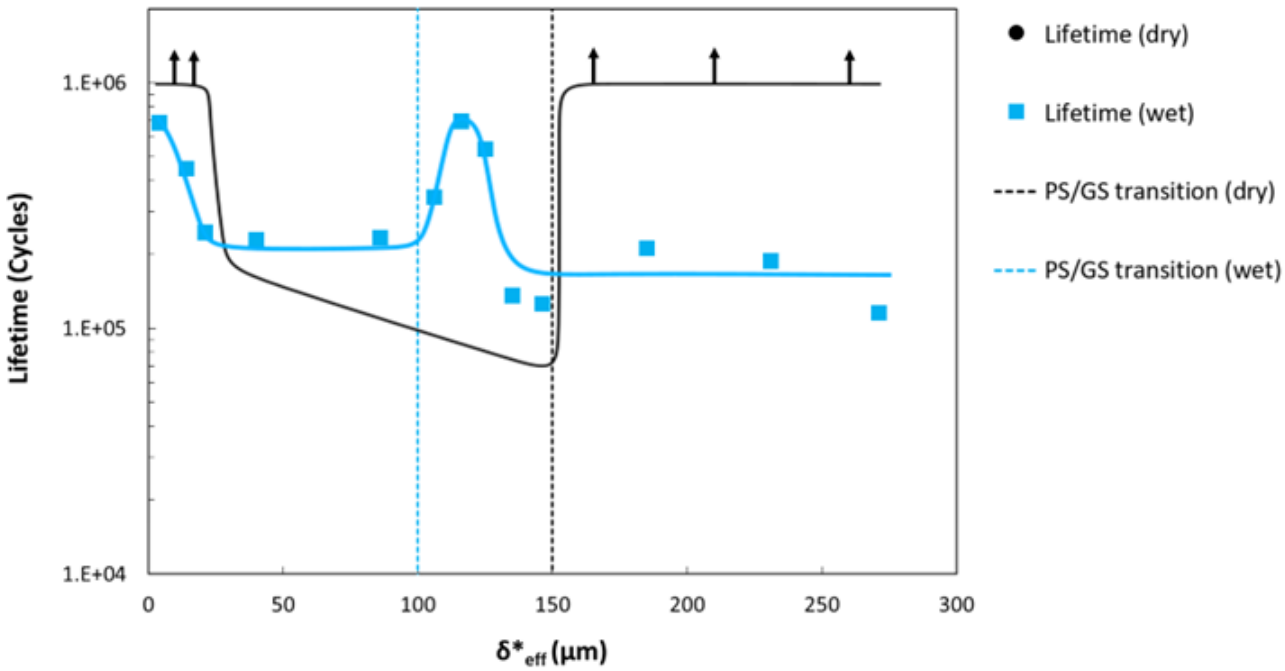


Figure 4 : courbe de fretting-fatigue (glissement en abscisse, cycles à rupture en ordonnée) pour le contact acier-acier sec (noir) et en eau de mer (bleu). PS/GS : « partial slip / gross slip »

a- Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay
b- Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes
c- Aérodynamique + servo pour le contrôleur + hydrodynamique pour les corps immergés + élastique pour la structure.
d- Modèle éléments finis : de type poutres en contact avec frottement en rotations finies et petits déplacements
e- Fissure amorcée en *fretting* puis propagée en fatigue
f- Glissement partiel : une partie de la surface de contact glisse, l'autre reste collée ; glissement total : toute la surface de contact glisse

---

Références :

1. F. Bussolati, M. Guiton, P.-A. Guidault, O. Allix, and P. Wriggers: Lecture Notes in Application and Computational Mechanics, vol. 93 (2019).

2. S. Montalvo, S. Fouvry, M. Martinez, F. Ropital, Tribology International, two articles submitted

3. A. Nouy and P. Ladeveze. **Multiscale Computational Strategy with Time and Space Homogenization: A Radial-Type Approximation Technique for Solving Microproblems**, International Journal for Multiscale Computational Engineering, 2(4), (2004).

>> DOI: 10.1615/IntJMultCompEng.v2.i4.40

Contacts scientifiques : martin.guiton@ifpen.fr ; michael.martinez@ifpen.fr ; francois.ropital@ifpen.fr

>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

Modélisation « du matériau à la structure » : le cas des câbles d’ancrage pour l’éolien offshore, en environnement corrosif

L’énergie éolienne représente une part croissante du mix énergétique grâce la construction de parcs permettant de réduire les coûts d’investissement et d’exploitation. Toutefois, au sein d’un parc, les éoliennes en aval subissent les sillages des rotors situés en amont, ce qui induit à la fois une réduction de leur production et une augmentation de leur sollicitation en fatigue. De plus, les éoliennes opèrent dans un environnement complexe, appelé couche limite atmosphérique (CLA), qui interagit avec ces sillages. Cette zone de l’atmosphère est soumise à des effets de grande échelle (gradients de pression, force de Coriolis[a]) mais également à des effets locaux, tels que les échanges thermiques avec le sol ou la topographie environnante.

Pour la simulation numérique (exemple de calcul à la Figure 1), il existe un véritable challenge lié au caractère multi-échelle du problème : cela nécessite en effet d’analyser et de modéliser l’impact de phénomènes kilométriques (turbulence atmosphérique) sur des sillages dont l’origine est d’échelle métrique (écoulement autour d’une pale).

Pour traiter cette problématique, un partenariat de recherche a été mis en place avec le CNRM (Centre National de Recherche en Météorologie) autour de l’outil de simulation Meso-NH). Le CNRM y a intégré une modélisation fine de la CLA, incluant les différents phénomènes d’importance pour l’éolien, tels que la turbulence, la stratification thermique, ou la topographie [1]. Pour sa part, IFPEN a implémenté dans cet outil des modèles représentatifs d’éoliennes, basés sur des approches de lignes ou de disques actuateurs [2] [3].
Ces évolutions ont permis d’étudier avec Meso-NH le comportement des sillages [4][5][6] et ont conduit au développement de modèles analytiques qui sont intégrés depuis dans FarmShadow^{TM}, l’outil mis au point par IFPEN pour la conception de fermes éoliennes.

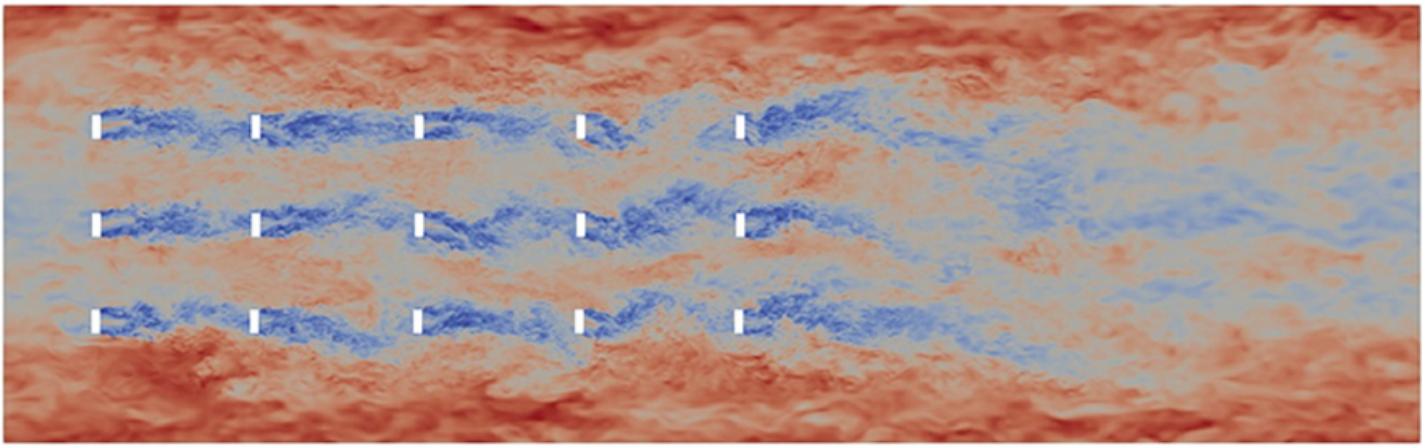


Figure 1 : Coupe horizontale du champ de vent, simulé par waLBerla[b] - IFPEN/FAU-Erlangen[c], traversant une ferme éolienne

L’amélioration induite par rapport aux outils de simulation existants est que FarmShadow^{TM} permet, en quelques secondes de temps de calcul, d’estimer la production d’un champ éolien. Couplé à des méthodes d’optimisation, il permet également de maximiser la production globale d’un parc en jouant sur le placement des éoliennes.

Par ailleurs, les nouveaux modèles analytiques de sillages instationnaires en interactions avec la CLA sont employés dans le code de calcul aero-hydro-servo-élastique DeepLines Wind^{TM}, utilisé pour dimensionner une éolienne au sein d'une ferme.

Dans ce cas, un point de blocage restant à lever est celui des temps de calcul : réalisées par LES^{d}, les simulations se limitent alors d'un point de vue pratique à quelques configurations incluant une à quelques turbines. Une approche alternative, basée sur les méthodes Lattice Boltzmann (LBM), pourrait permettre de lever ce verrou et est actuellement à l'étude (figure 2), en partenariat avec l'université d'Erlangen [7]. En exploitant les capacités des cartes graphiques des ordinateurs, des premiers résultats montrent une réduction des temps de calcul d'un facteur 400. Des travaux en cours visent à implémenter dans ce solveur les modèles physiques nécessaires à la simulation de la CLA.

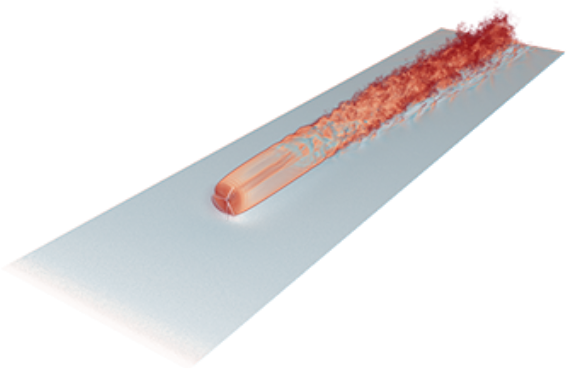


Figure 2 : Simulation LBM d'une éolienne horizontale (IFPEN/FAU-Erlangen)

a- Force de Coriolis : force inertielle agissant perpendiculairement à la direction du mouvement d'un corps en déplacement dans un milieu lui-même en rotation uniforme
b- waLBerla : Widely applicable Lattice Boltzmann from Erlangen : framework massivement parallèle pour les applications multi-physiques
c- FAU-Erlangen : Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
d- Large Eddy Simulation : modèle mathématique de turbulence utilisé en dynamique des fluides numérique

---

Références :

1. Lac, C., Chaboureau, J. P., Masson, V., Pinty, J. P., Tulet, P., Escobar, J., ... & Wautelet, P. (2018). **Overview of the Meso-NH model version 5.4 and its applications**. Geoscientific Model Development, 11(5), 1929-1969.
   >> DOI: 10.5194/gmd-11-1929-2018

2. Joulin, P. A. (2019). **Modélisation à fine échelle des interactions entre parcs éoliens et météorologie locale** (Doctoral dissertation).
   >> https://www.theses.fr/2019INPT0135

3. Joulin, P. A., Mayol, M. L., Masson, V., Blondel, F., Rodier, Q., Cathelain, M., & Lac, C. (2020). **The actuator line method in the meteorological LES model meso-NH to analyze the horns rev 1 wind farm photo case**. Frontiers in Earth Science, 7, 350.
>> DOI: 10.3389/feart.2019.00350

4. Blondel, F., Cathelain, M., **An alternative form of the super-Gaussian wind turbine wake model**, Wind Energ. Sci., 2020
>> DOI: 10.5194/wes-5-1225-2020

5. Blondel, F., Cathelain, M., Joulin, P.A., Bozonnet, P., **An adaptation of the super-Gaussian wake model for yawed wind turbines**, J. Phys.: Conf. Ser. 1618 062031, 2020
>> DOI: 10.1088/1742-6596/1618/6/062031

6. Jézéquel, E., Blondel, F., and Masson, V.: **Breakdown of the velocity and turbulence in the wake of a wind turbine – Part 2: Analytical modeling**, Wind Energ. Sci. Discuss. [preprint], in review, 2022
>> DOI: 10.5194/wes-2022-47

7. Schottenhamml, H., Anciaux-Sedrakian A., Blondel F., Borras-Nadal, A., Joulin, P.A., Rüde, U., **Evaluation of a lattice Boltzmann-based wind-turbine actuator line model against a Navier-Stokes approach**, 2022
>> DOI: 10.1088/1742-6596/2265/2/022027

Contacts scientifiques : pierre-antoine.joulin@ifpen.fr ; frederic.blondel@ifpen.fr

>> NUMÉRO 49 DE SCIENCE@IFPEN

Optimisation des parcs éoliens : dans le sillage des progrès en modélisation

Numéro 49 de Science@ifpen - spécial "Physico-Chimie et Mécanique appliquées"
10 novembre 2022

Lien vers la page web :