Science @ifpen
N° 51 - Avril 2023

Rédigé le 14 avril 2023

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



Hélène Olivier-Bourbigou
Responsable de la coordination de la recherche fondamentale

IFPEN est engagé dans la triple transition énergétique, écologique et numérique pour atteindre l'objectif ambitieux mais nécessaire de la neutralité carbone à l'horizon 2050.

Je suis convaincue que notre **recherche fondamentale**, structurée en neuf verrous scientifiques (VS) et en synergie avec les problématiques appliquées, est primordiale pour l'émergence de **solutions innovantes**.

Dans ce numéro, je vous propose de découvrir chaque verrou scientifique au travers d'un fait marquant.

Cette sélection me permet de mettre en lumière combien cette structuration favorise la transversalité et les démarches interdisciplinaires avec :

- **L'émergence de nouveaux sujets reliés aux transitions**. Energétique avec le comportement des batteries (VS1 et VS6) et l'éolien (simulation de parcs VS8). Ecologique avec la vulnérabilité des tourbières (VS5) et l'économie environnementale (VS9). Numérique avec le recours à des approches avancées (VS2, VS3, VS7) ou à l'apprentissage profond pour innover dans les matériaux (VS4) ;

- **Les adjacences avec nos thématiques plus historiques**. Les travaux de l'article VS1 exploitent nos savoir-faire issus de l'étude des moteurs thermiques. Ceux de l'article VS2 sont inspirés de l'approche auparavant exploitée sur les hydrocarbures. L'étude hydrologique évoquée dans l'article VS5 s'appuie sur le logiciel de modélisation de bassin DionisosFlow® ;

- **La capacité à bâtir des passerelles entre les compétences**. Utiliser les nouvelles approches numériques pour caractériser les phénomènes d'adsorption et de transport de molécules dans des milieux de structure complexes (article VS3). Recourir à la modélisation moléculaire au service des phénomènes de dégradation électrochimique des batteries (article VS6). Coupler les méthodes de Lattice-Boltzmann avec le calcul massivement parallèle par GPU (article VS8) pour aboutir à simulation accélérée en temps réel de parcs éoliens entiers ;

- **La coopération scientifique et la mutualisation des savoirs**. Ces travaux s'appuient sur des collaborations au niveau national ou international avec des partenaires académiques (voir les articles VS2, VS8), des organismes de recherche (article VS5), des acteurs industriels (article VS4) ou encore l'ADEME (article VS9).

Bonne lecture !

Hélène Olivier-Bourbigou

LES BRÈVES

L'électrification de la mobilité est une inflexion majeure pour réduire les émissions de gaz à effet de serre et de polluants atmosphériques par le secteur des transports. Dans ce contexte, la batterie Li-ion est actuellement la technologie partagée par tous les constructeurs automobiles pour fournir le stockage d'énergie nécessaire au déploiement des véhicules électrifiés.

Cependant, les batteries Li-ion peuvent connaître des incidents aux conséquences dramatiques, désignées par le terme d'emballement thermique. Cela peut résulter de conditions de fonctionnement anormales : température excessive, déformation mécanique, surcharge électrique, court-circuit-interne. Cet emballement thermique se caractérise par une combustion violente, difficile à contrôler et entraînant l'émission de gaz toxiques. Ce problème est aujourd'hui une question centrale de sécurité qui impacte fortement la conception et les stratégies de contrôle des batteries.

Les approches numériques développées depuis 10 ans par IFPEN [1] permettent de modéliser et simuler le comportement des batteries pendant l'emballement thermique. Cependant, les modèles mis au point doivent s'appuyer sur des données expérimentales fiables pour obtenir aussi bien des éléments de compréhension qu'une description quantitative fine du phénomène.

C'est pourquoi un nouveau dispositif de caractérisation de l'emballement thermique a été mis en place : il fonctionne dans une chambre optiquement accessible et met en jeu des caméras à haute vitesse, des capteurs de pression et de température ainsi que des systèmes d'analyse de gaz. Le protocole mis au point permet de soumettre une cellule (élément unitaire de la batterie) à des conditions d'abus contrôlées et de combiner les différents types de mesures disponibles.

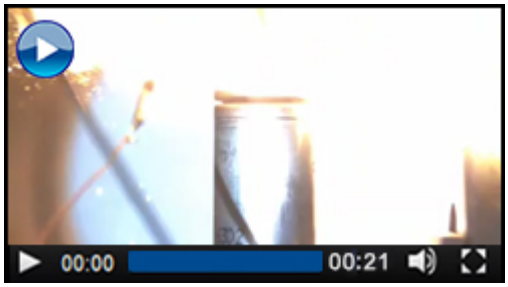
Les résultats obtenus à ce jour ont permis d'identifier les quatre phases successives conduisant au phénomène d'emballement thermique [2] :

1. augmentation de la température de la batterie liée à des réactions de dégradation interne ;
2. chute de tension aux bornes de la batterie ;
3. éjection, à travers la soupape de sécurité de la cellule, d'un mélange de liquide et de gaz (dégazage) ;
4. emballement thermique proprement dit : fortes réactions exothermiques conduisant à l'apparition de flammes sortant de la batterie.

De plus, la vidéo couleur à haute vitesse permet une compréhension qualitative de ces différentes phases et de leur échelle de temps. l'observation d'un jet diphasique lors du dégazage (phase 3) révèle notamment le rôle du gaz formé à l'intérieur d'une cellule : celui-ci est responsable de l'expulsion d'une partie importante de la phase liquide/solide présente dans la batterie. Pendant la dernière phase, les images acquises fournissent des indications sur l'initiation de la combustion : elle semble s'initier à l'extérieur de la cellule défectueuse à cause des particules incandescentes expulsées par celle-ci.



Phase de dégazage



Emballement Thermique

Ce dispositif et le protocole associé vont servir à acquérir les données nécessaires à la réalisation de modèles numériques à la fois prédictifs et plus précis. En particulier, les travaux de thèse* en cours à IFPEN visent à développer une méthodologie d'analyse quantitative des gaz émis et à comprendre en détail le mécanisme d'initiation de la combustion.

* Titre de la thèse : *Développement d'un protocole de caractérisation du phénomène d'emballement thermique des batteries Li-ion*.

Références :

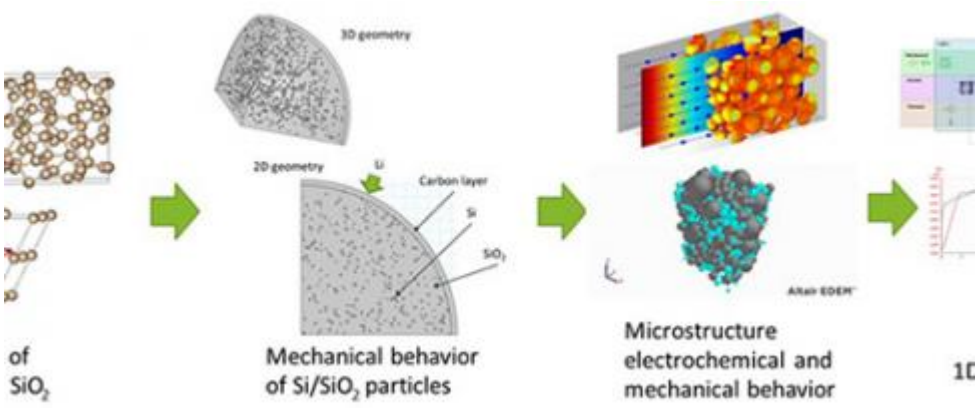
1. Sara Abada, Martin Petit, Amandine Lecocq, Guy Marlair, Valérie Sauvant-Moynot et François Huet, ***Combined experimental and modeling approaches of the thermal runaway of fresh and aged lithium-ion batteries***, Journal of Power Sources, Elsevier, 2018, 399, pp.264-273. >> https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.07.094

2. L. Richardet, M. Bardi, M. Lecompte, V. Brocchetto, S. de Persis, ***Innovative experimental set up to characterize Lithium-ion batteries thermal runaway***, European Combustion Meeting, 2023

Contacts scientifiques : michele.bardi@ifpen.fr, matthieu.lecomte@ifpen.fr

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

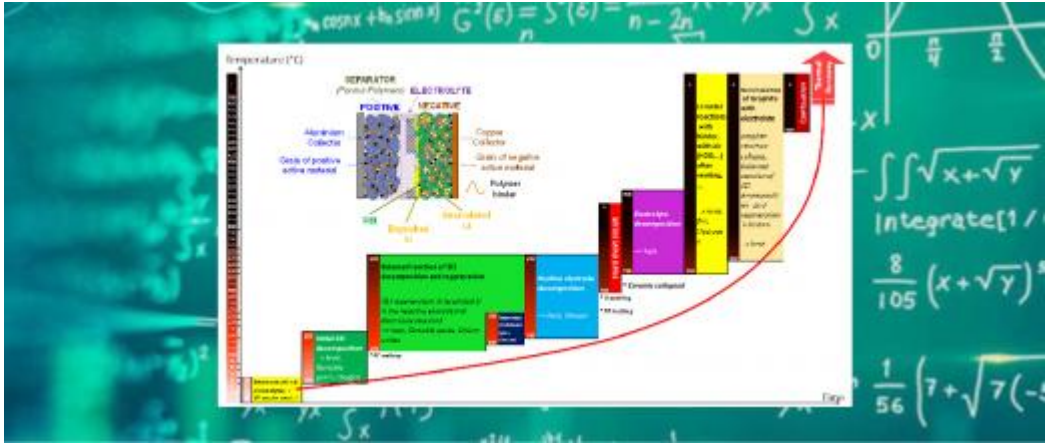


Comportement des batteries : une complexité mieux prise en compte par la modélisation

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 (...) et en cas d'emballement thermique (défaillance, usage abusif)...

Batteries

Électrochimie et corrosion **Modélisation et simulation des systèmes**



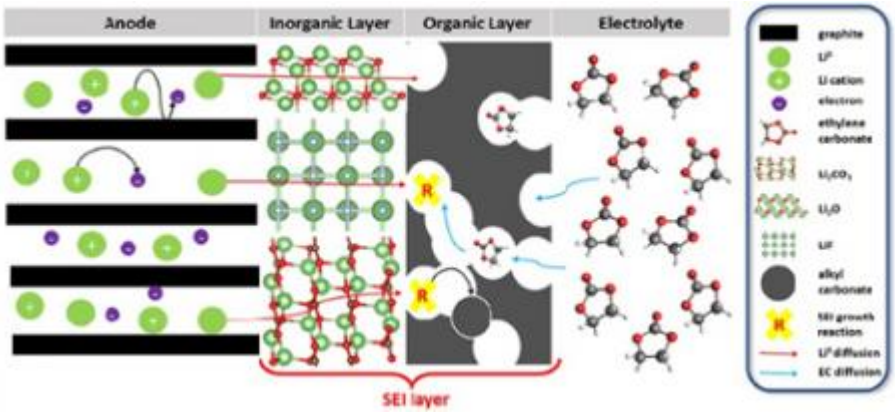
Recherche fondamentale

Actualités juin 2021

La modélisation pour améliorer la sécurité des batteries lithium-ion

Batteries

Chimie physique | Électrochimie et corrosion | Sciences de l'ingénieur



VS6 - Comment mieux maîtriser la Perte de Capacité des Batteries au Lithium

Tout le monde a remarqué que les batteries à base d'ions lithium, utilisées dans nos téléphones portables, ordinateurs, etc., perdent progressivement de l'autonomie au point de devenir inutilisables. Cette perte d'autonomie résulte notamment d'une couche, dite SEI, qui s'installe entre une des électrodes et l'électrolyte de la batterie. Cette couche apparaît dès le premier cycle de charge/décharge de la batterie, et croît progressivement en consommant des ions de lithium, de manière irréversible et donc au détriment de la capacité de la batterie...

Batteries

Thermodynamique / Modélisation moléculaire | Électrochimie et corrosion

VS1 - Nouveau dispositif expérimental pour étudier la sécurité des batteries

La déshydratation d'alcools bio-sourcés en alcènes est une réaction-clé pour l'obtention de grands intermédiaires chimiques à partir de biomasse. Elle est efficacement catalysée par des zéolithes présentant des sites acides de Brønsted[1], et un enjeu crucial est le contrôle de sa sélectivité. En partant par exemple d'un alcool ramifié comme l'isobutanol, la réaction de déshydratation ne produit pas uniquement de l'isobutène (isomère ramifié parmi les butènes), comme attendu par conservation du squelette carboné de la molécule (Figure 1 (a)). C'est ainsi que malgré des conditions opératoires où l'isobutène ne devrait pas s'isomériser en alcènes linéaires, cette réaction produit également des butènes linéaires.

Les alcènes linéaires sont des intermédiaires prisés en chimie, aussi la connaissance des mécanismes permettant de les produire par transformation de l'isobutanol est-elle importante, car requise pour contrôler la sélectivité de ces réactions.

Dans le cadre d'une collaboration avec l'Université Comenius de Bratislava (équipe de T. Bu?ko), la recherche des mécanismes de transformation de l'isobutanol en alcènes a été menée à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), sur le cas d'une zéolithe modèle, de type chabazite. Ainsi, les états de transition importants ont été identifiés, de même que les barrières d'énergie libre correspondantes [1].

Cette approche a permis de distinguer deux grandes familles de mécanismes nouveaux, à même d'expliquer la formation d'alcènes linéaires à partir d'isobutanol :

1. un mécanisme séquentiel d'isomérisation de l'isobutanol en autres butanols, notamment en butan-2-ol (Figure 1 (b)), alcool linéaire qui peut alors être déshydraté en alcènes linéaires,
2. un mécanisme synchrone d'isomérisation et de déshydratation de l'isobutanol, permettant de former directement des alcènes linéaires.

L'analyse des profils d'énergie libre a permis de trouver les chemins les plus favorables. Dans des conditions typiques de déshydratation, le calcul DFT suggère que le premier mécanisme constitue la voie réactionnelle la plus rapide.

Ces résultats expliquent les produits de réaction observés et ouvrent la voie à un contrôle de la sélectivité pour la production d'alcènes linéaires.

La quantification fine des constantes de vitesse est à présent nécessaire pour prédire l'activité et la sélectivité d'un tel catalyseur, par l'intermédiaire d'un modèle cinétique. Cette quantification nécessite une investigation de ces nouveaux mécanismes par dynamique moléculaire *ab initio*, dans l'esprit de travaux précédents, relatifs à l'isomérisation et au craquage d'alcènes.

De plus, l'influence de la nature de la zéolithe reste à analyser. En effet, si la simulation a porté sur le cas de la chabazite, on sait expérimentalement que la zéolithe ferriérite présente une sélectivité élevée en alcènes linéaires. Le rôle de la surface externe des cristallites de zéolithe est ainsi questionné [2, 3] et son étude fait l'objet de la collaboration qui se poursuit avec l'Université de Bratislava. Ce rôle est étudié *via* la modélisation de la réactivité des surfaces externes de la ferriérite et a donné lieu au séjour à IFPEN d'une de ses doctorantes au dernier trimestre 2022.

Cette étude se poursuivra également dans le cadre du projet ciblé MAMABIO (collaboration IFPEN, Ecole des Ponts ParisTech, Université de Lorraine, Université de Caen) au sein du PEPR B-BEST.

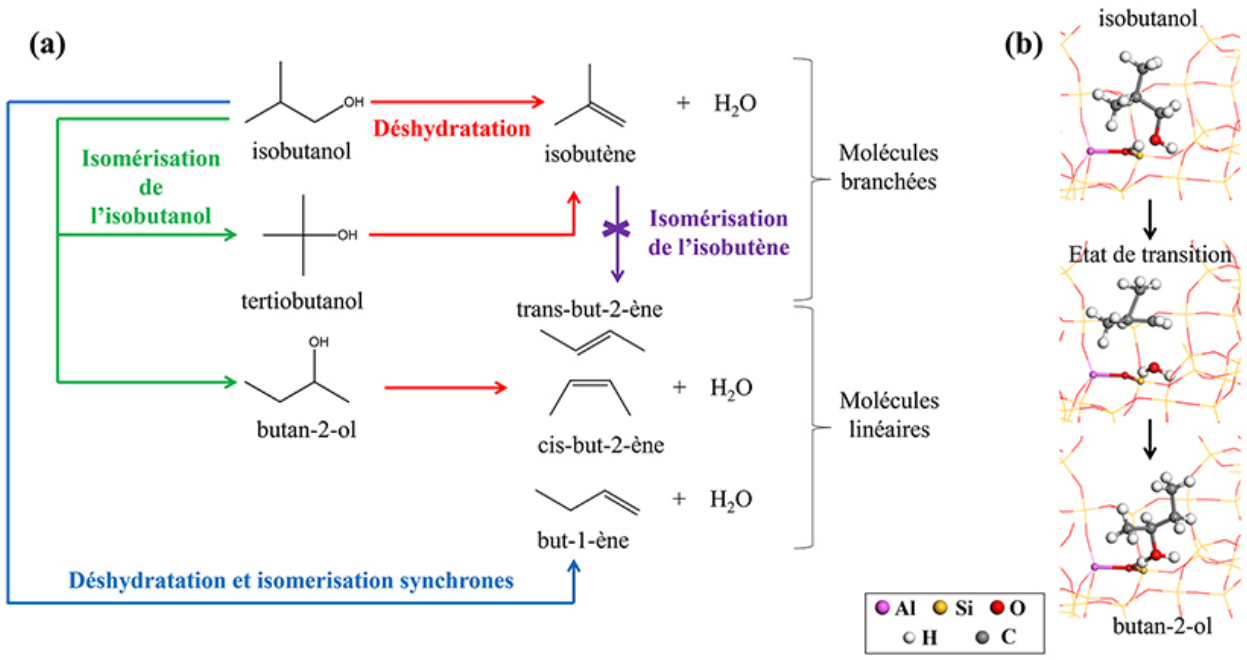


Figure 1 : (a) Schéma réactionnel de formation d'alcènes branchés (isobutène) et linéaires (but-1-ène et buta-2-ènes),
(b) structures calculées en DFT concernant la réaction d'isomérisation de l'isobutanol en butan-2-ol.

[1]- Acide de type « donneur de proton ».

Références :

1. M. Gešvandtnerová, T. Bu?ko, P. Raybaud, C. Chizallet, ***Monomolecular mechanisms of isobutanol conversion to butenes catalyzed by acidic zeolites: Alcohol isomerization as a key to the production of linear butenes***, J. Catal., 413, 786, 2022.
>> https://doi.org/10.1016/j.jcat.2022.07.025

2. S. Van Daele, D. Minoux, N. Nesterenko, S. Maury, V. Coupard, V. Valtchev, A. Travert, J.-P. Gilson, ***A highly selective FER-based catalyst to produce n-butenes from isobutanol***, Appl. Catal. B, 284, 119699, 2021.
>> https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.119699

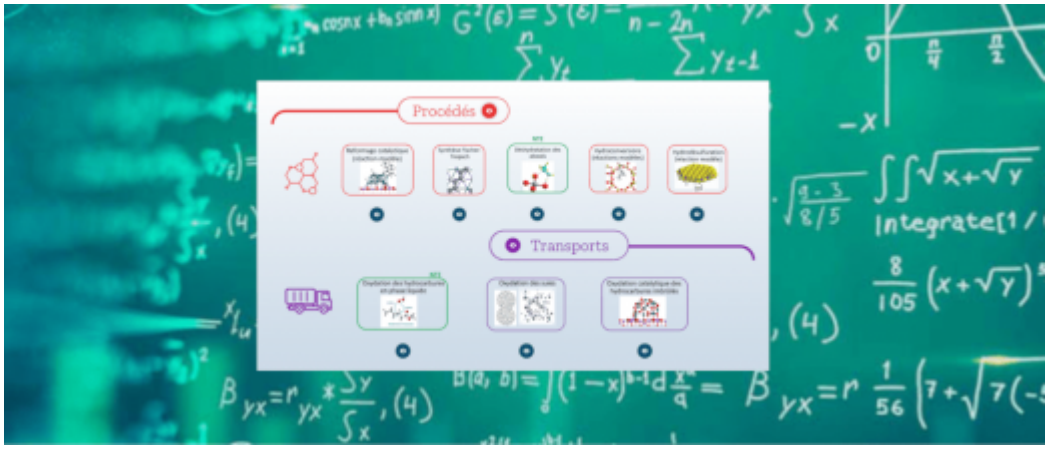
3. Z. Buniazet, A. Cabiac, S. Maury, D. Bianchi, S. Loridant, ***Unexpected selectivity of ferrierite for the conversion of isobutanol to linear butenes and water effects***, Appl. Catal. B, 243, 594, 2019.

>> https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2018.11.007

Contact scientifique : Céline Chizallet

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

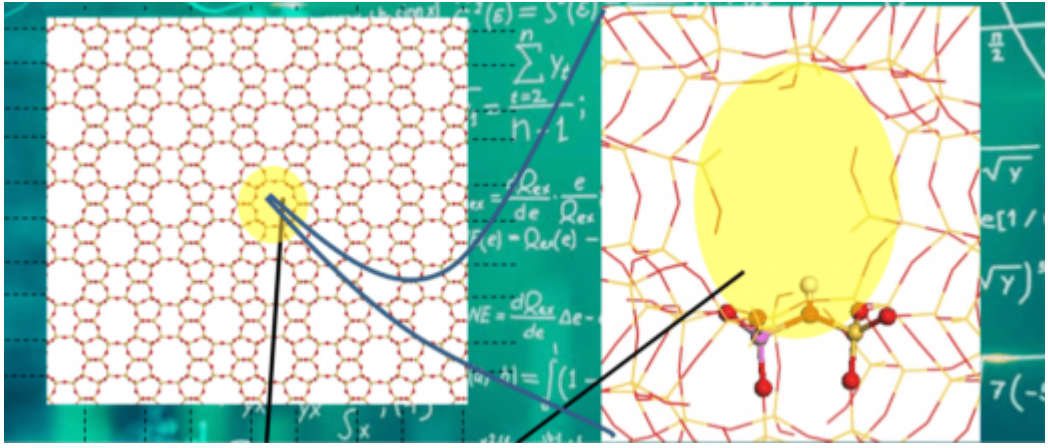


Recherche fondamentale

Actualités avril 2021

Prédire la performance depuis l'atome jusqu'au réacteur pour améliorer les procédés industriels

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Biosciences et biotechnologies | Biocatalyse

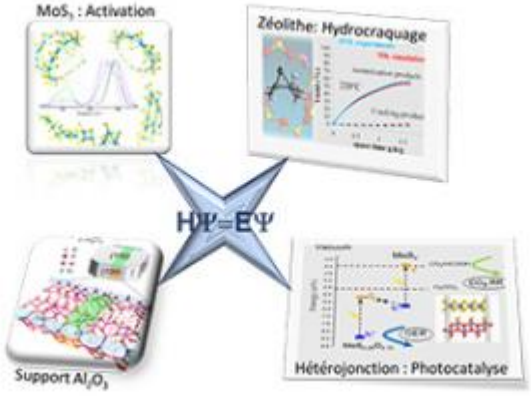


Recherche fondamentale

Actualités novembre 2020

La surface externe des zéolithes mise en lumière par le calcul quantique

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Sciences physiques | Thermodynamique / Modélisation moléculaire | Chimie physique



Modélisation moléculaire : un outil central pour la catalyse hétérogène d'aujourd'hui et de demain

La chimie théorique au niveau quantique (théorie de la fonctionnelle de la densité, DFT) constitue un outil incontournable pour rationaliser les mécanismes réactionnels en jeu dans la préparation des catalyseurs ainsi que dans leur utilisation, grâce à une amélioration de leur activité [1,2]. De nombreux travaux d'IFPEN visent à élucider ces mécanismes catalytiques d'intérêt pour les procédés industriels...

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Chimie théorique

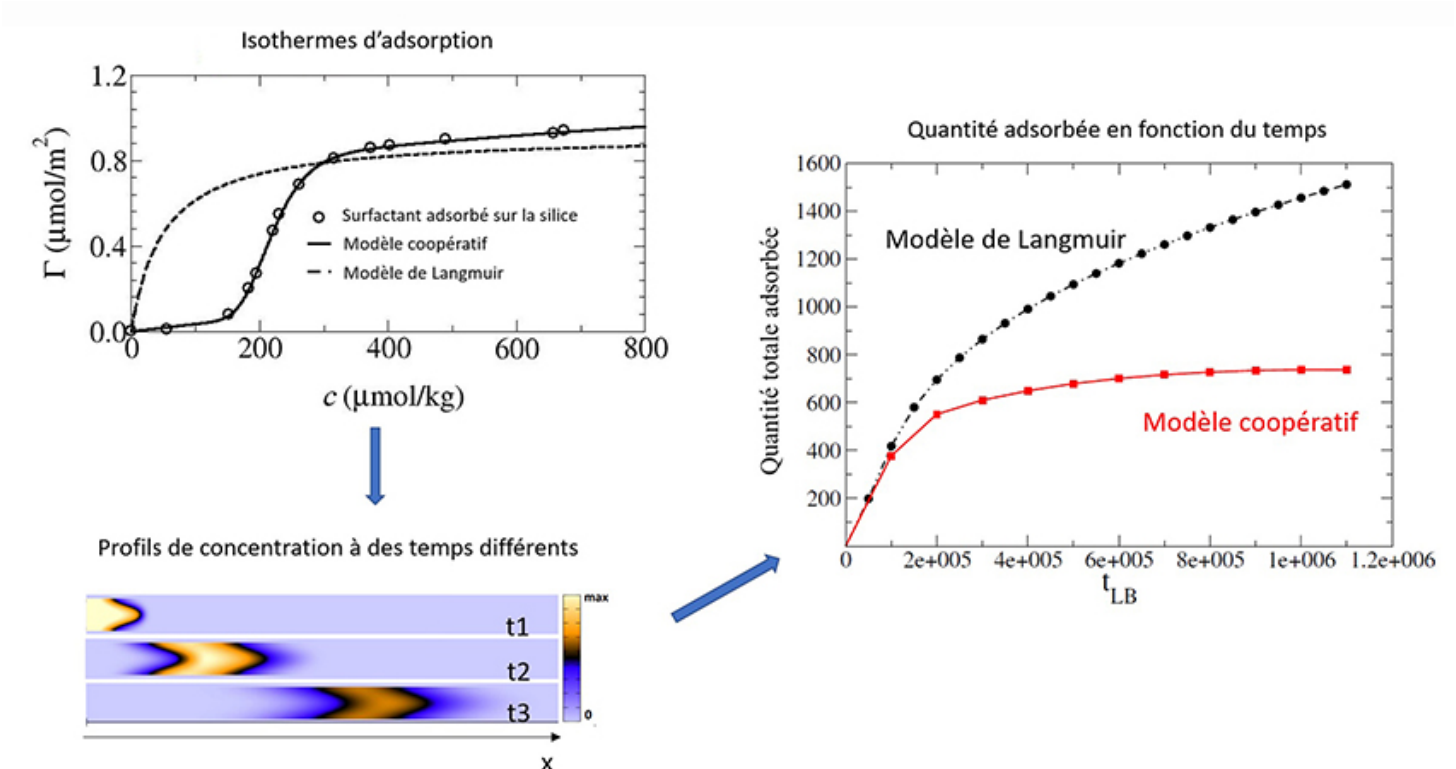
VS2 - Le calcul quantique révèle des mécanismes-clés pour la chimie biosourcée

Le transport au sein de structures poreuses de molécules qui s'adsorbent sur les surfaces joue un rôle important dans nombre de contextes et d'applications très différentes. Parmi ceux-ci, nous pouvons citer le transport de polluants dans les sols, les procédés industriels de transformation catalytique ou de purification, ou encore les techniques chromatographiques. Dans toutes ces situations, les effets d'adsorption sont connus pour fortement influencer la diffusion et le transport des fluides qui circulent au travers de géométries confinées.

Au regard de cet effet d'adsorption, une attention particulière doit être accordée au comportement de molécules complexes, comme par exemple les surfactants. Ces molécules sont en effet caractérisées par des comportements physico-chimiques à l'interface fluide-solide qui – la plupart du temps – ne peuvent pas être décrits à l'aide d'un modèle d'adsorption classique (par exemple le modèle de Langmuir qui décrit l'adsorption d'une monocouche). Souvent, leur comportement à l'interface se caractérisant par la formation d'agrégats, leur adsorption peut être dominée par des effets coopératifs et ce comportement interfacial peut exercer une influence spécifique et non négligeable sur leurs propriétés de transport. Une meilleure compréhension du transport de ce type de molécules par rapport aux molécules classiques est donc nécessaire.

Dans le cadre d'un travail de thèse* en collaboration avec le CNRS et l'Université de Grenoble, nous avons étudié le couplage entre la cinétique de l'adsorption et le transport de surfactants *via* une approche Lattice-Boltzmann généralisée, qui intègre cet effet d'adsorption [1]. Nous avons pour cela simulé le transport de molécules entre deux plans parallèles, avec des isothermes d'adsorption issues de données expérimentales (surfactant anionique adsorbé sur la silice : voir figure 1.a). Les simulations ont été effectuées selon deux hypothèses d'adsorption différentes du point de vue de la thermodynamique : d'une part le modèle classique de Langmuir et d'autre part un modèle d'adsorption de surfactants développé par nos soins pour inclure des effets coopératifs [2].

Nous avons montré que la quantité totale adsorbée prévue avec le modèle de Langmuir est beaucoup plus importante que celle estimée par le nouveau modèle thermodynamique, lequel reproduit bien les données expérimentales [3]. De plus, avec le modèle de Langmuir, cette quantité augmente plus fortement au cours du temps (figure 1.b) en raison de sa thermodynamique incapable de décrire correctement le comportement d'interface spécifique des molécules complexes.



Ces résultats montrent que dans les modèles de transport, obtenir un comportement d'adsorption/transport physiquement cohérent nécessite de mettre au point et d'inclure une modélisation propre à chaque type d'adsorption, en se basant sur des données expérimentales. Ceci est en particulier vrai pour une meilleure prédiction du transport des polluants complexes (nanoplastiques, PFAS[1], métaux lourds, produits cosmétiques, etc.) dont le comportement spécifique en termes d'adsorption doit être pris en compte par la modélisation.

Les travaux à venir consisteront à étudier le couplage entre transport et adsorption dans des géométries représentatives de structures plus complexes, telles que des milieux poreux. La difficulté de cette tâche tient à l'hétérogénéité du milieu poreux qui induit un champ de vitesse spécifique, marqué par de fortes disparités.

[1]- Substances perfluoroalkylées

* Thèse de Zaineb Zaafouri : ***Modeling surfactant adsorption and transport in porous media: influence of adsorption thermodynamics and kinetics***.
>> https://theses.hal.science/tel-03187740

Références :

1. Z. Zaafouri, G. Batôt, C. Nieto-Draghi, B. Rotenberg, D. Bauer, B. Coasne, ***Lattice Boltzmann method for adsorption under stationary and transient conditions: Interplay between transport and adsorption kinetics in porous media***, Physical Review E (2021)
   >> https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.015314

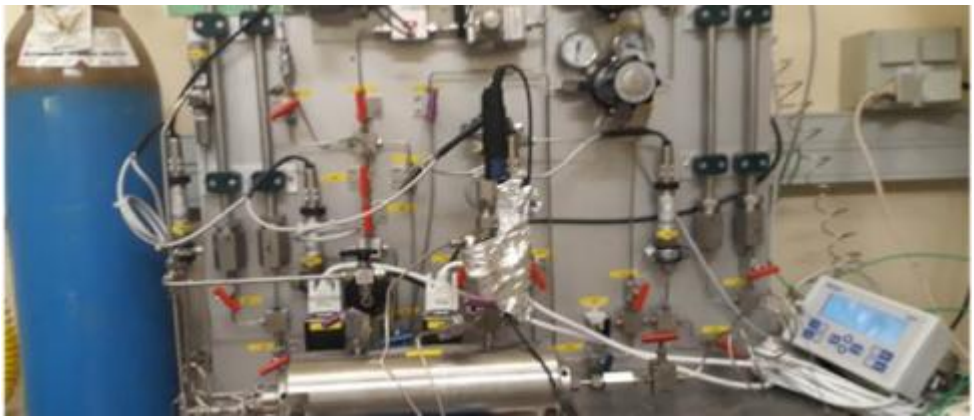
2. Z. Zaafouri, D. Bauer, G. Batôt, C. Nieto-Draghi, B. Coasne, ***Cooperative Effects Dominating the Thermodynamics and Kinetics of Surfactant Adsorption in Porous Media: From Lateral Interactions to Surface Aggregation***, Journal of Physical Chemistry B (2020)
   >> https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c08226

3. Z. Zaafouri, G. Batôt, C. Nieto-Draghi, B. Coasne, D. Bauer, ***Impact of adsorption kinetics on pollutant dispersion in water flowing in nanopores: A Lattice Boltzmann approach to stationary and transient conditions***, Advances in Water Research, (2022)
   >> https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2022.104143

Contact scientifique : daniela.bauer@ifpen.fr

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



L’adsorption, un facteur clé pour le stockage géologique

Les couches géologiques faiblement perméables, déjà connues dans le cadre de l’exploitation pétrolière, connaissent actuellement un regain d’int

Géosciences | Pétrophysique et transferts en milieux poreux | Sciences physiques | Physique du transfert et du transport | Chimie physique | Science des surfaces, des interfaces et des matériaux



Interactions entre les minéraux argileux et les tensioactifs anioniques

THÈSE DE ARIANE SUZZONI

Sciences physiques | Rhéologie et comportement des matériaux | Chimie physique
Fluides complexes, colloïdes et matière condensée
Science des surfaces, des interfaces et des matériaux



Recherche fondamentale

Actualités janvier 2018

Mieux comprendre les phénomènes de diffusion au cœur des catalyseurs

Hydrocarbures responsables | Carburants | Pétrochimie

Analyse et caractérisation | Sciences physiques | Physique du transfert et du transport | Chimie physique | Science des surfaces, des interfaces et des matériaux

VS3 - Simulation du couplage adsorption/transport via une approche Lattice-Boltzmann généralisée

A l'intérieur des matériaux poreux, les phénomènes physico-chimiques tels que le transport de matière, les réactions catalytiques et les effets capillaires sont fortement influencés par la géométrie des réseaux de pores, c'est-à-dire le degré de porosité, la distribution de taille des pores et leur connectivité. Ces caractéristiques sont habituellement obtenues *via* des modèles macroscopiques appliqués à des résultats expérimentaux de caractérisation. Par ailleurs, une estimation fiable de ces propriétés à une échelle plus fine peut provenir d'approches, dites microscopiques, par mécanique statistique.

IFPEN et Saint Gobain Research Provence ont choisi d'appréhender ce problème de manière différente, en explorant une nouvelle voie numérique. Celle-ci couple directement la modélisation numérique réaliste des microstructures avec la simulation d'un phénomène qui y prend place : la physisorption.

La démarche suivie dans ce travail a reposé sur trois piliers :

- des modèles aléatoires pour représenter de manière réaliste des microstructures complexes ;
- la morphologie mathématique pour reproduire les différents processus physiques de la physisorption [1] ;
- et l'apprentissage profond pour accélérer les résultats de simulation [2].

La nouvelle approche consistant à reproduire artificiellement les phénomènes physiques par des opérateurs de morphologie mathématique ouvre la voie à des simulations de physisorption dont les résultats sont directement comparables à des résultats expérimentaux. Le calcul de ces opérations peut être estimé par apprentissage profond, à l'aide de réseaux de neurones convolutifs, ce qui a pour effet une réduction considérable du temps de calcul.

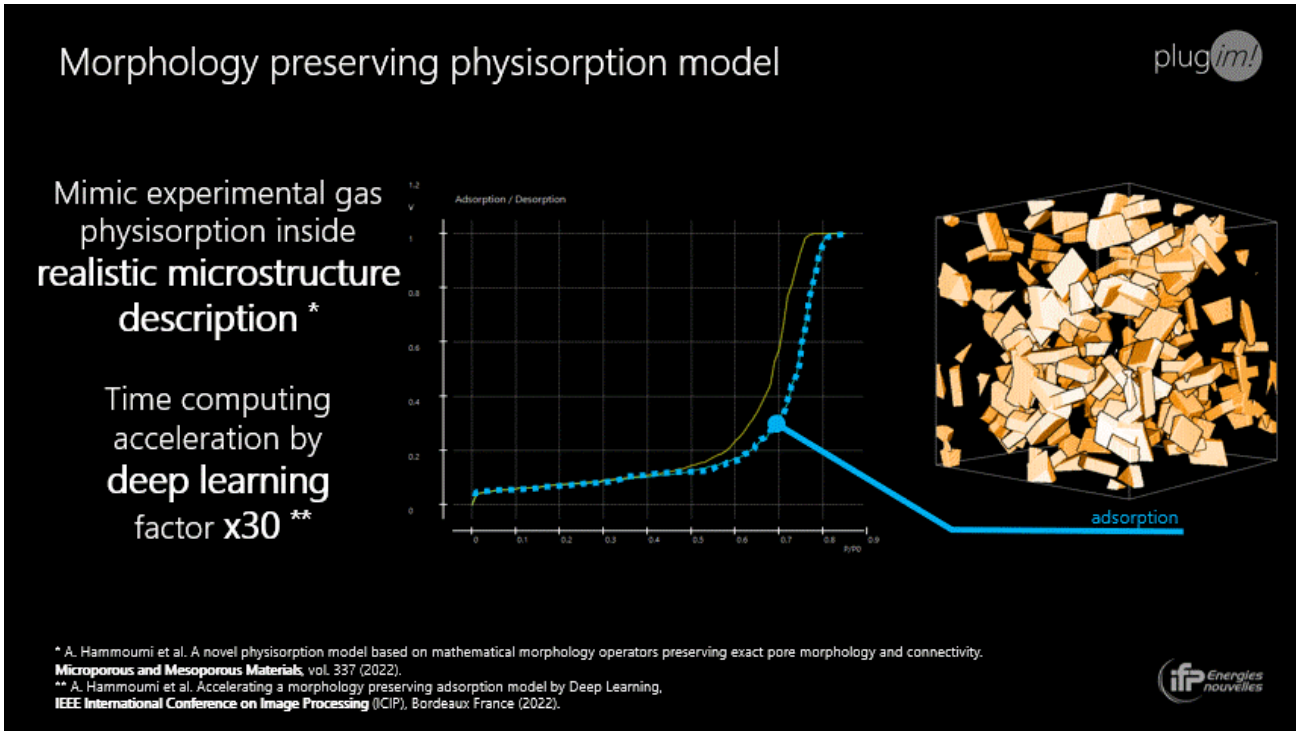


Illustration d'une simulation d'adsorption et désorption à partir de notre nouvelle voie numérique.

Cette méthodologie originale a été appliquée avec succès à des structures ordonnées tels que les alumines SBA-15 et KIT-5, conduisant à des isothermes numériques proches des isothermes expérimentales (figure). Des résultats comparables ont été obtenus pour des alumines plus complexes, dotées d'une porosité multi-échelles contrôlée, et qui ont été synthétisées spécialement pour ce travail [3].

Elargir la démarche à d'autres techniques expérimentales de caractérisation de matériaux poreux s'annonce comme la perspective immédiate dans la poursuite de ce travail avec, comme cible ultime, des matériaux innovants directement conçus à partir des propriétés d'usage visées.

Références :

1. Hammoumi A., Moreaud M., Jeulin D., Jolimaitre E., Chevalier T., Sorbier L., Klotz M., Novikov A., ***A novel physisorption model based on mathematical morphology operators preserving exact pore morphology and connectivity, Microporous and Mesoporous Materials***, (2022).
   >> https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2022.111847

2. Hammoumi A., Moreaud M., Jolimaitre E., Chevalier T., Klotz M., Novikov A. ***Accelerating a Morphology-Preserving Adsorption Model by Deep Learning***, 2022 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP), (2022).
   >> https://doi.org/10.1109/ICIP46576.2022.9897406

3. Hammoumi A., ***Analysis-Driven Design of Digital Multi-scale Microstructures of Materials***. PhD thesis, Université Paris-Saclay, (2022).
>> https://www.theses.fr/2022UPASG083

Contacts scientifiques : adam.hammoumi@ifpen.fr ; Maxime Moreaud

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

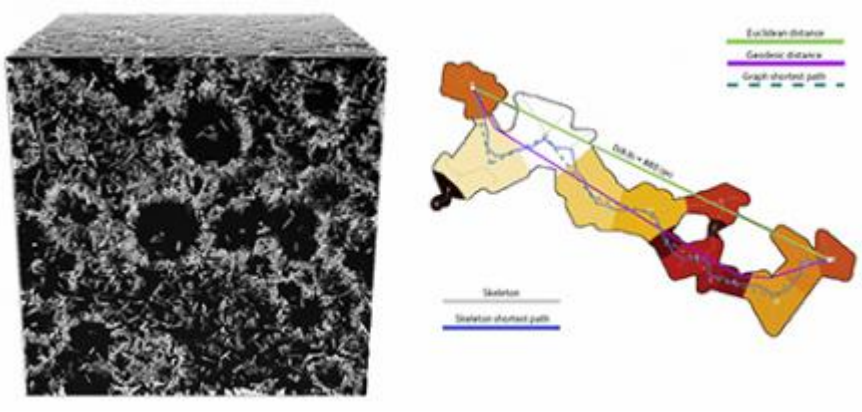
VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Diffusion dans les catalyseurs : un chemin souvent tortueux !

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...

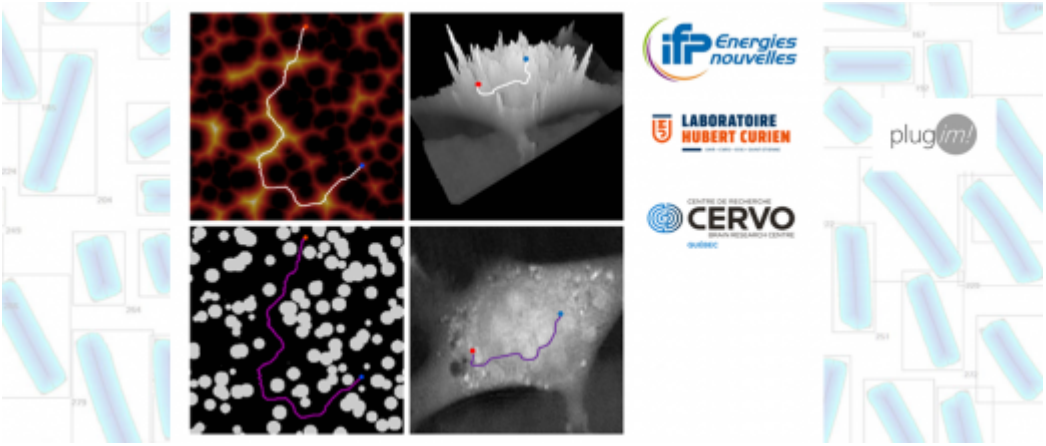
Analyse structurale et imagerie | **Génie chimique et génie des procédés** | **Modélisation et simulation des systèmes**



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’efficience 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 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

VS4 - Nouvelle voie numérique pour la caractérisation de matériaux poreux virtuels

Les tourbières n'occupent que 3 % de la surface terrestre mais abritent plus de 25 % du carbone organique stocké dans les couches superficielles du sous-sol. Les débris végétaux s'y accumulent lentement et y subissent une décomposition ralentie sous l'effet d'un environnement saturé en eau et appauvri en oxygène. Les tourbes y sont donc encore décomposables et particulièrement vulnérables aux changements environnementaux. Ainsi, l'exposition de ces stocks de carbone organique aux effets du changement climatique (hausse des températures, sécheresse, incendies) et aux activités humaines (drainage et destruction des zones humides) peut conduire à la libération d'importantes quantités de gaz à effet de serre.

Pour mieux comprendre et caractériser ces phénomènes de stockage/déstockage du carbone, une équipe internationale s'est récemment intéressée aux tourbières de la Cuvette Centrale du Bassin du Congo[1] (figure 1.a). Les chercheurs du CEREGE et de MARUM ont réussi à reconstituer l'évolution de l'environnement et du climat régional au cours des 22000 dernières années grâce à l'étude des biomarqueurs (figure 1.b).

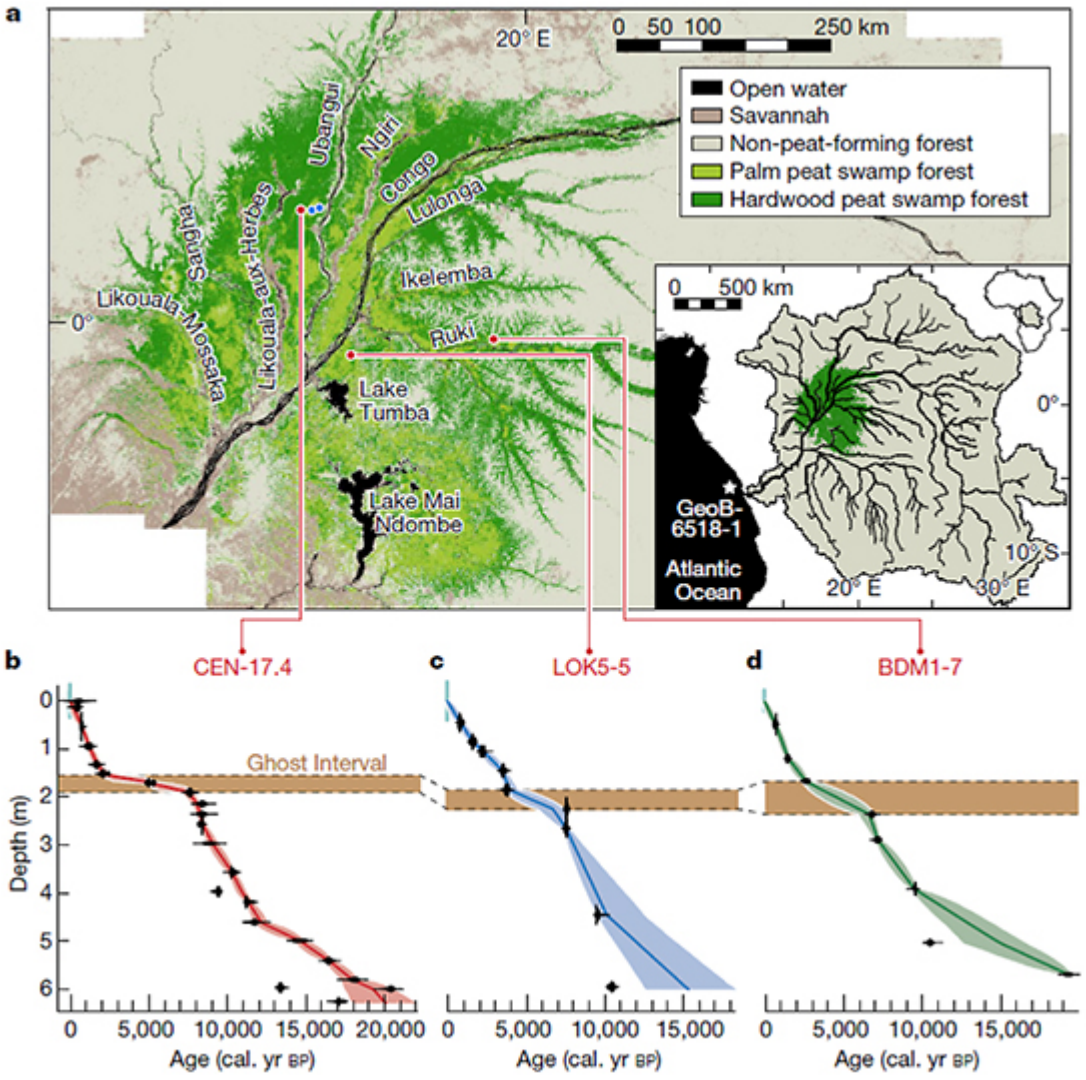


Figure 1 : Tourbières du Bassin Central du Congo [1] :
a) Carte de la Cuvette Centrale montrant la distribution spatiale de la forêt marécageuse et la localisation des carottes de tourbe ;

b) Chronologies radiocarbone des carottes de tourbe étudiées.
La rupture dans les profils âge-profondeur modélisés, mise en évidence par une bande marron horizontale, indique l'intervalle de décomposition des tourbes. Les lignes en pointillés montrent les corrélations stratigraphiques.

Par ailleurs, les chercheurs d'IFPEN, de l'UNIL[2] et du British Geological Survey ont mesuré le degré de décomposition des tourbes grâce à des analyses Rock-Eval®. L'étude globale, publiée par la revue *Nature* [1], a notamment montré qu'entre 5000 et 2000 ans avant notre ère, la région a connu une sécheresse responsable de la décomposition de plusieurs mètres de tourbes, laquelle a nécessairement provoqué l'émission d'une très importante quantité de gaz à effet de serre.

Si les conditions hydroclimatiques permettant la formation des tourbes se sont progressivement rétablies il y a près de 2000 ans, cette étude a montré que ces tourbières restaient très vulnérables aux changements hydroclimatiques. De tels changements, comme une faible modification de la pluviométrie et/ou de la saisonnalité, pourraient de nouveau provoquer la libération d'une quantité de dioxyde de carbone équivalente à trois années d'émissions mondiales actuelles.

Afin d'éviter des flux de gaz à effet de serre vers l'atmosphère, sous l'effet d'une nouvelle phase de dégradation de ces tourbières, il faut alors disposer d'outils pour prévoir l'effet des changements environnementaux (climat, impact anthropique) sur le bilan hydrologique régional. En effet, les tourbières topogènes[3], comme celle étudiée, sont principalement contrôlées par la quantité et la répartition des précipitations dans le bassin versant. Aussi, afin de comprendre leur formation et leur dynamique temporelle, il est nécessaire de décrire l'évolution hydrologique en surface et dans la nappe en chaque point de ce bassin.

Pour ce faire, une modélisation hydrologique-stratigraphique a été réalisée dans le cadre du projet VULCARFATE [2, 3]. A partir de la carte de topographie du Congo (figure 2a) et des données climatiques, les écoulements d'eau de surface et de subsurface (figure 2b) ont été déterminés à l'aide du logiciel DionisosFlow®. Cette modélisation a ensuite été couplée à des lois de transport des sédiments afin de déterminer la localisation de certains environnements sédimentaires (figure 2c).

Concernant les tourbières, on dispose ainsi d'un outil pour anticiper l'effet du changement climatique et de l'impact anthropique sur leurs stocks de carbone, ce qui pourra permettre de mieux gérer leur vulnérabilité.

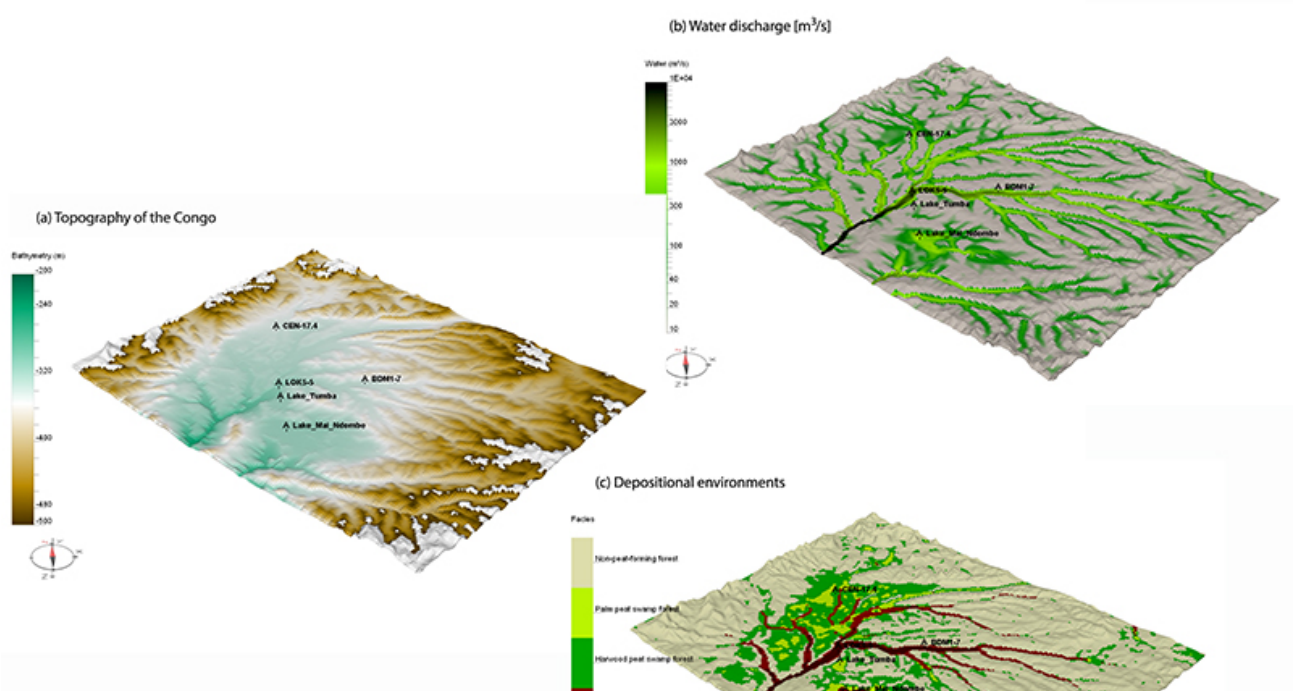


Figure 2 : Modélisation hydrologique et stratigraphique de la cuvette centrale du Congo à l'aide de DionisosFlow®.
a) carte de topographie actuelle ;
b) simulation du débit d'eau en surface ;
c) simulation de la répartition des différents types de forêts marécageuses et de tourbes.

[1]- S'étendant sur 16,7 millions d'hectares et représentant 28 % du carbone des tourbières tropicales.
[2]- Université de Lausanne.
[3]- Tourbière où l'eau est piégée dans des dépressions, des cuvettes.

Références :

1. Garcin, Y., Schefuß, E., Dargie, G.C., Hawthorne, D., Lawson, I.T., Sebag, D. et al. ***Hydroclimatic vulnerability of peat carbon in the central Congo Basin***. Nature 612, 277–282 (2022).
   >> https://doi.org/10.1038/s41586-022-05389-3

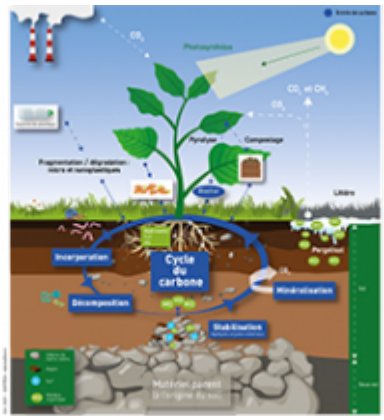
2. Chauveau, B., Granjeon, D., Sebag, D., Bemer, E., Frappart, F., Braun, J-J., Bogning, S. ***Le bassin de l'Ogooué : Devenir des sols et du carbone associé sous contraintes climatiques et anthropiques***. Journées de Modélisation des Surfaces Continentales, Grenoble, 6-7 octobre 2022.

3. ***Impact des changements globaux sur les réservoirs vulnérables de carbone : piégeage et émissions de carbone dans les sols et les eaux de l'Arctique à l'Equateur*** : projet interdisciplinaire, coordonné par l'IRD et regroupant des partenaires de 6 pays (France, USA, Russie, Gabon, Espagne et Suisse).
   >> https://vulcar-fate.obs-mip.fr

Contacts scientifiques : david.sebag@ifpen.fr ; Didier Granjeon ; elisabeth.bemer@ifpen.fr

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

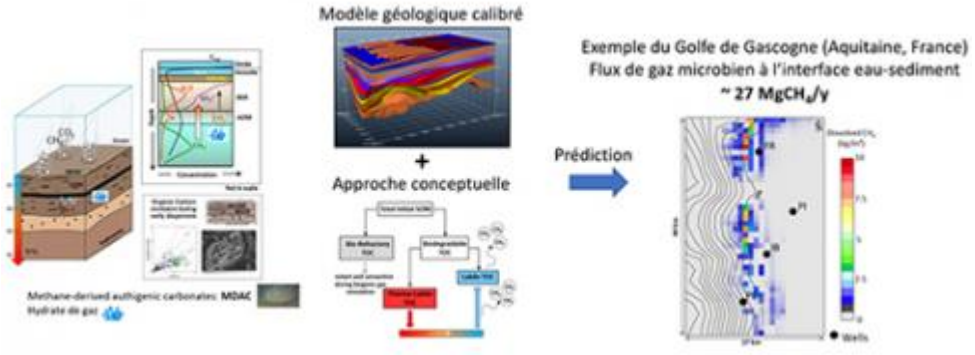
VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Rock-Eval® : au service de l’étude des sols pour l’enjeu climatique

Parmi les leviers pour abaisser la concentration de CO2 dans l’atmosphère figure bien sûr la réduction des émissions de gaz à effet de serre d’origine fossile, mais il est aussi possible d’accroître les quantités de carbone stockées dans les sols (...) Dans le contexte actuel de dérèglement climatique, connaître l’évolution du carbone dans les sols devient un enjeu critique. C’est pourquoi IFPEN s’est intéressé au potentiel du Rock-Eval®, un fleuron de la recherche pétrolière...

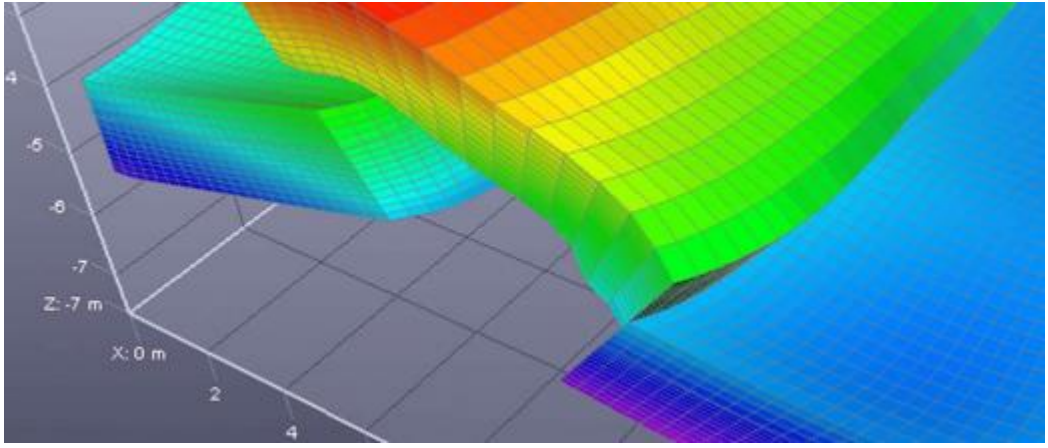
Géosciences | Géochimie | Analyse et caractérisation | Analyse chimique | Biosciences et biotechnologies | Microbiologie



Du gaz naturel dans les sédiments marins : un enjeu pour le climat ?

Tout comme le dioxyde de carbone (CO2), mais doté d'un PRG bien supérieur, le méthane (CH4) est un gaz qui, d'après l'AIE , est responsable d'environ 30 % de l'augmentation des températures mondiales depuis la révolution industrielle...

Géosciences | **Géochimie** | **Géostatistique - Modélisation géologique**



Recherche fondamentale

Actualités avril 2018

La simulation en géosciences : un exemple d’outil au service de l’environnement, des énergies et du climat

Géosciences | Pétrophysique et transferts en milieux poreux | Sciences physiques | Mathématiques et informatique | Maillage et visualisation

VS5 - Vulnérabilité des tourbières au changement climatique

Tout le monde a remarqué que les batteries à base d'ions lithium, utilisées dans nos téléphones portables, ordinateurs, etc., perdent progressivement de l'autonomie au point de devenir inutilisables. Cette perte d'autonomie résulte notamment d'une couche, dite SEI[1], qui s'installe entre une des électrodes et l'électrolyte de la batterie (cf. Figure). Cette couche apparaît dès le premier cycle de charge/décharge de la batterie, et croît progressivement en consommant des ions de lithium, de manière irréversible et donc au détriment de la capacité de la batterie [1].

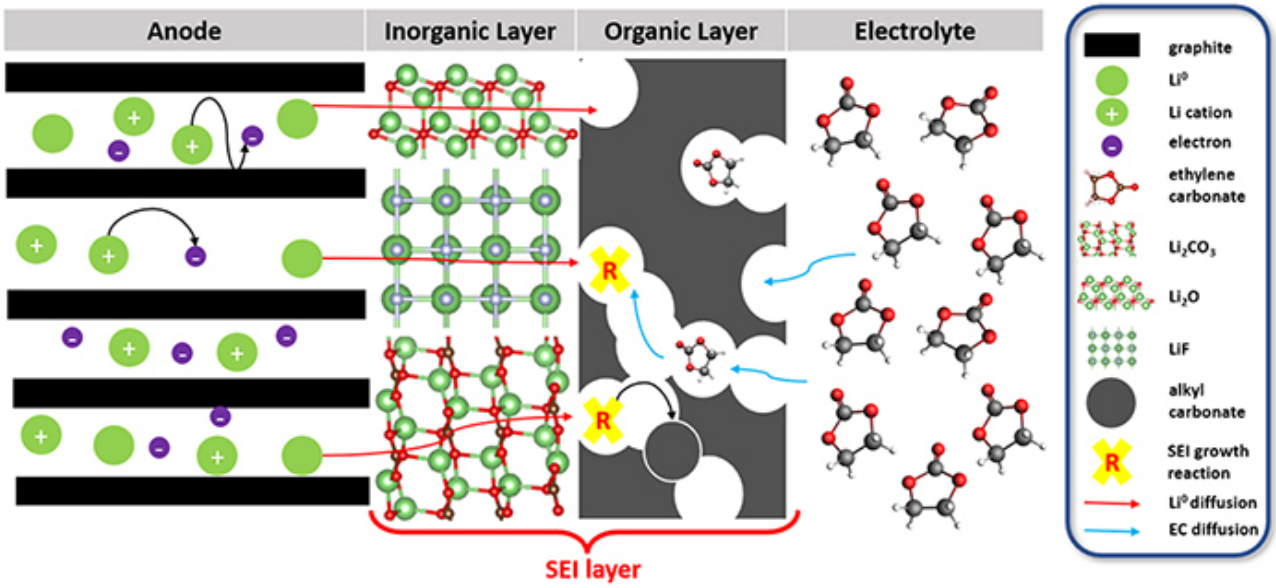


Figure : Représentation schématique de l'anode graphite/lithium, les couches inorganique et organique formant la couche SEI et l'électrolyte.

Si la composition chimique de cette couche SEI est aisément déterminée par des moyens expérimentaux d'analyse, d'autres aspects concernant sa formation, comme les conditions thermodynamiques de son apparition et sa cinétique de croissance, sont plus avantageusement étudiés par des approches théoriques, comme la modélisation moléculaire. Sur ce type de phénomène, la prise en compte des électrons est essentielle, car ils sont impliqués dans la réaction de réduction du solvant (composé de l'électrolyte) à l'interface de l'électrode négative, et c'est cette réaction qui initie et alimente la formation de la couche SEI.

Les méthodes basées sur la chimie quantique sont bien adaptées à ce besoin, car elles prennent en compte explicitement les électrons. Toutefois, elles sont trop consommatrices de ressources informatiques pour être appliquées à un système de la taille d'une batterie. Une approche multi-échelle apparaît dès lors comme une alternative pertinente, en permettant une description fine des réactions chimiques de dégradation du solvant sur des temps allant de la picoseconde jusqu'à la seconde, voire plus, et qui peut être étendue par le recours à la méthode de Monte Carlo cinétique (kMC[2]).

La première étape de ce travail de thèse a consisté à établir une base de données des réactions chimiques mises en jeu, avec leurs énergies de réaction et leurs énergies d'activation [2], grandeurs qui influent directement sur la vitesse de réaction. Ces énergies ont été calculées avec des méthodes basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT[3]).

Les simulations kMC réalisées ensuite ont notamment montré que des sels comme le Li_2CO_3 ou Li_2O, issus de la dégradation de l'électrolyte, jouaient un rôle important dans la formation de la SEI [2]. Ces sels favorisent en effet l'apparition de diverses espèces organiques de dégradation, dont la présence a été corroborée par des observations analytiques, et qui engendrent une structure de SEI à couches multiples.

Les simulations kMC ont également permis de prédire la perte de capacité de la batterie en fonction de la composition de la couche SEI initialement formée (Figure 2). Il s'avère ainsi qu'en l'absence de Li_2CO_3 ou Li_2O, cette décroissance de capacité est non-linéaire, et qu'en leur présence elle est plus lente. Ces résultats sont en accord avec d'autres études expérimentales et théoriques [3] et incitent à prendre aussi en compte l'apparition d'autres sels issus des réactions de dégradation, comme par exemple le LiF. Dans l'avenir, il est prévu d'élargir la bibliothèque de référence des réactions de dégradation pouvant se produire en présence de ces sels, et d'utiliser des méthodes moins gourmandes en CPU que la DFT.

[1]- Solid Electrolyte Interphase.
[2]- Méthode permettant de simuler le comportement de systèmes évoluant selon une équation maîtresse, en utilisant des données cinétiques des réactions chimiques élémentaires.
[3]- Density Functional Theory.

* Titre de la thèse : ***Mieux comprendre la formation et croissance de la Solid Electrolyte Interphase dans les batteries Li-ion par une approche de modélisation moléculaire***.

Références :

1. A. Wang, S. Kadam, H. Li, S. Shi, Y. Qi, ***Review on modeling of the anode solid electrolyte interphase (SEI) for lithium-ion batteries***, NPJ Comput. Mater. 4 (2018) 359.
   >> https://doi.org/10.1038/s41524-018-0064-0

2. Mohammed Bin Jassar, Carine Michel, Sara Abada, Theodorus de Bruin, Sylvain Tant, Carlos Nieto-Draghi, Stephan N. Steinmann. ***A joint DFT-kMC study to model ethylene carbonate decomposition reactions: SEI formation, growth, and capacity loss during calendar aging of Li-metal batteries***, ACS Appl. Energy Mater.
   >> https://doi.org/10.1021/acsaem.3c00372

3. Kolzenberg, L. von; Latz, A.; Horstmann, B. ***Solid-Electrolyte Interphase During Battery Cycling: Theory of Growth Regimes***. ChemSusChem 2020.
   >> https://doi.org/10.1002/cssc.202000867

Contacts scientifiques : carlos.nieto@ifpen.fr ; theodorus.de-bruin@ifpen.fr

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités

décembre 2021

JIP EleTher : une communauté industrielle pour mieux comprendre les modèles thermodynamiques d'électrolytes



Recherche fondamentale

Actualités mars 2021

Méthodes de simulation moléculaire : mieux comprendre les premiers instants de la synthèse des zéolithes (en anglais)

Sciences chimiques | Cinétique de la catalyse et des réactions | Sciences physiques | Thermodynamique / Modélisation moléculaire

VS6 - Comment mieux maîtriser la Perte de Capacité des Batteries au Lithium

Porté par les enjeux environnementaux et de sobriété, l'intérêt pour l'efficacité énergétique des véhicules et pour la réduction de l'impact de la mobilité va grandissant. Si la promotion de modes de transport alternatifs à la voiture reste le principal levier du changement, beaucoup peut être encore fait du côté de la régulation du trafic routier.

Une équipe IFPEN a travaillé sur ce sujet dans le cadre d'une thèse en collaboration avec le Gipsa-lab[1], et a développé dans ce cadre un outil dynamique de régulation par zone des limitations de vitesse.

Une première étape de l'étude a consisté à établir, pour différentes limitations de vitesse, l'effet de la congestion du trafic sur la surconsommation de carburant, en couplant :

- un simulateur de trafic en libre accès2, pour reproduire la dynamique de véhicules sous différents niveaux de congestion ;
- et un modèle développé par IFPEN pour caractériser le fonctionnement d'un moteur et estimer avec une grande précision la consommation et les émissions polluantes d'un véhicule en fonction de divers facteurs : technologies du groupe motopropulseur, conditions et style de conduite, topographie du réseau, etc. [1, 2]

La Figure 1 reproduit en régime stationnaire la consommation moyenne des véhicules pour différentes densités de trafic et pour une limitation de vitesse de 20 km/h ou de 50 km/h. Elle est obtenue en simulant le trafic routier en régime stationnaire (cas d'un anneau routier).

Lorsque la densité du trafic est faible, une limitation de vitesse de 50 km/h est plus efficace énergétiquement en raison du régime du moteur plus favorable tant que la circulation reste fluide. A l'inverse, au-delà d'une certaine densité, une limitation de 20 km/h devient moins énergivore. Cela s'explique par le fait que l'apparition du phénomène d'« accordéon » est retardée, avec une intensité plus faible des accélérations associées lesquelles sont grandement responsables de la surconsommation.

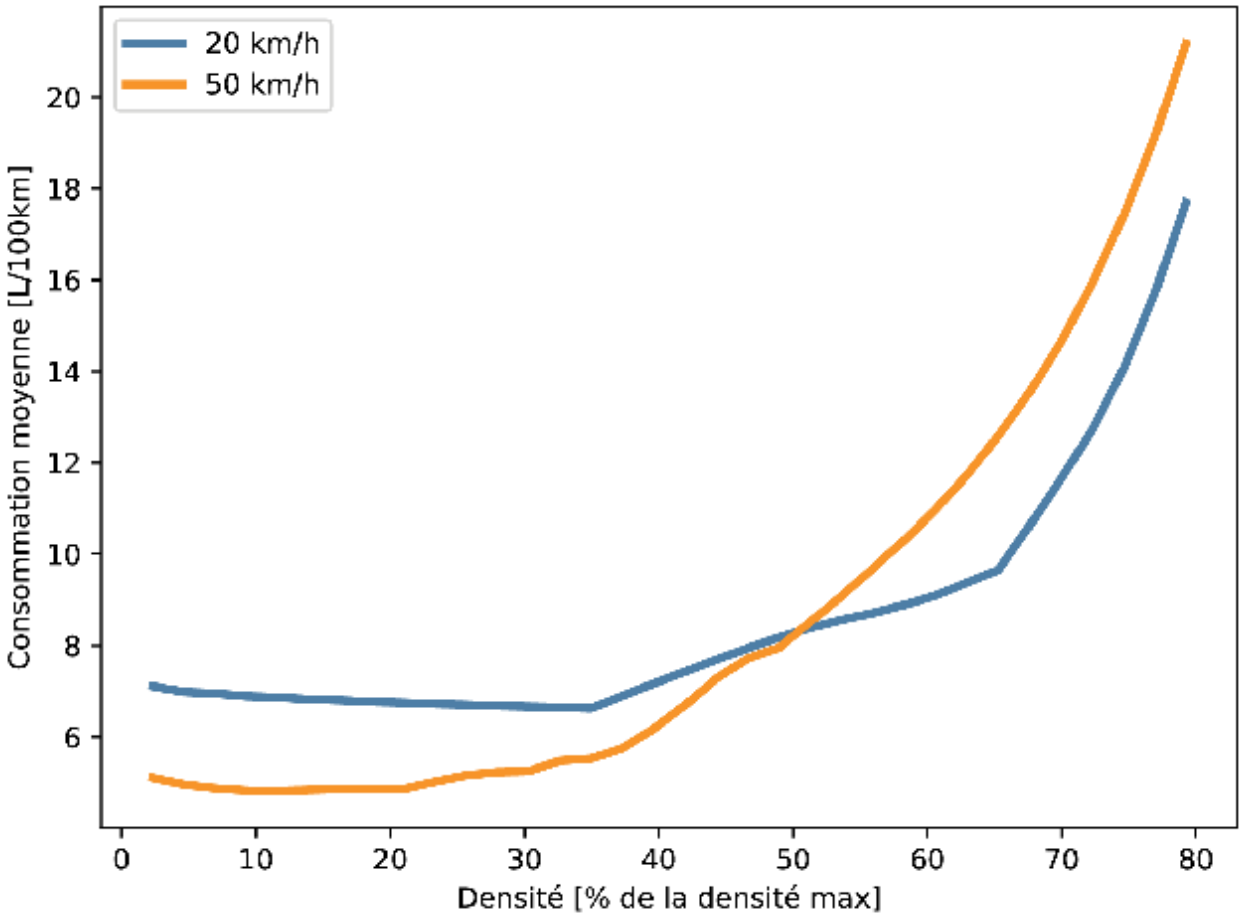


Figure 1 : Consommation de carburant moyenne en fonction de la densité du trafic pour deux niveaux de limitation de vitesse.

À la suite de ces observations, l'idée d'un régulateur a émergé, afin de pouvoir adapter en temps réel les limitations de vitesse d'une zone urbaine [3, 4] et ainsi réduire la consommation de carburant globale du trafic.

L'impact de cette régulation a été évalué par simulation numérique sur un réseau routier d'environ 28 km, constitué d'une zone urbaine et d'une zone péri-urbaine, à une heure de pointe. Son effet a été comparé à celui de deux autres scénarios :

- un scénario de référence : avec des zones de limitations de vitesse constantes ;
- et un scénario dit « contrôle d'accès » : avec une régulation de la durée au vert des feux tricolores.

L'étude met en évidence que la régulation des limitations de vitesse permet de :

- diminuer la consommation de carburant (figure 2.a) ;
- réduire les émissions polluantes (figure 2.b) ;
- fluidifier le trafic, en augmentant la distance parcourue (figure 2.c).

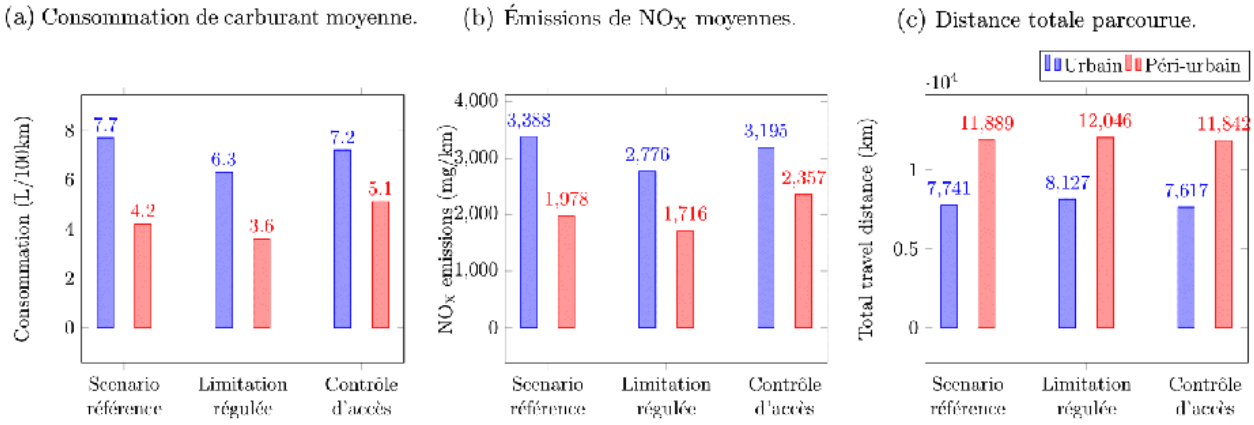


Figure 2 : Consommation de carburant, émissions de NOx, et fluidité du trafic pour chacune des trois stratégies de contrôle.

En pratique, le régulateur abaisse légèrement les limitations de vitesse des brins routiers menant à des zones sur le point de se congestionner. Cette anticipation permet de limiter la congestion ainsi que la surconsommation et la surémission qui s'ensuivent. On note que cela permet aussi de fluidifier le trafic.

Par ailleurs, cette méthode se révèle plus avantageuse que le contrôle des feux de signalisation, à la fois en termes d'efficacité énergétique et de fluidité du trafic, grâce à des accélérations moins fortes et des arrêts moins fréquents [5].

Pour donner la pleine mesure de son potentiel, la régulation de limitation de vitesse devra être évaluée sur des réseaux routiers urbains plus complexes et éventuellement couplée à des pratiques telles que l'eco-driving.

[1]- Grenoble Images Parole Signal Automatique.
[2]- Logiciel SUMO (Simulation of Urban Mobility).

Références :

1. L. Thibault, P. Degeilh, O. Lepreux, L. Voise, G. Alix, G. Corde, ***A new GPS-based method to estimate real driving emissions***, IEEE International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC), 2016.
   >> https://doi.org/10.1109/ITSC.2016.7795776

2. A. Pirayre, P. Michel, S. Rodriguez, A. Chasse, ***Driving Behavior Identification and Real-World Fuel Consumption Estimation With Crowdsensing Data***, IEEE International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC), 2022.
>> https://doi.org/10.1109/TITS.2022.3169534

3. B. Othman, G. De Nunzio, D. Di Domenico, C. Canudas-de-Wit, ***Analysis of the Impact of Variable Speed Limits on Environmental Sustainability and Traffic Performance in Urban Networks***, IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems, 2022.
>> https://doi.org/10.1109/TITS.2022.3192129

4. B. Othman, ***Limitations de vitesse variables et contrôle d'accès dans un réseau routier urbain pour une meilleure durabilité environnementale***, thèse de doctorat, 2021.
>> https://www.theses.fr/2021GRALT065

5. B. Othman, G. De Nunzio, D. Di Domenico, C. Canudas-de-Wit, ***Urban Road Traffic Fuel Consumption Optimization via Variable Speed Limits or Signalized Access Control: A Comparative Study***, IEEE Conference on Decision and Control (CDC), 2021.
>> https://doi.org/10.1109/CDC45484.2021.9683194

Contacts scientifiques : bassel.othman@ifpen.fr ; Giovanni De Nunzio

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

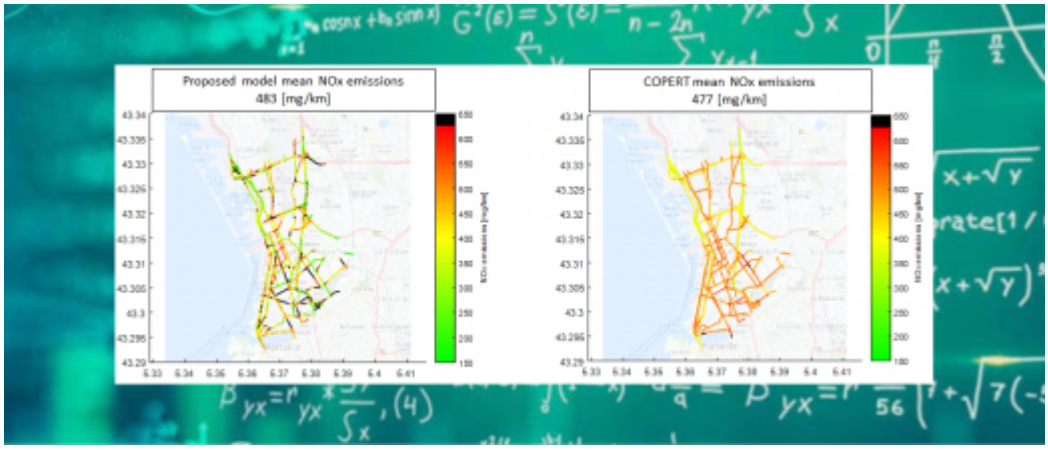


Innovation et industrie

Actualités octobre 2021

IFPEN et Paris Ouest La Défense s’allient pour mieux comprendre et anticiper la mobilité du territoire

Communiqués de presse

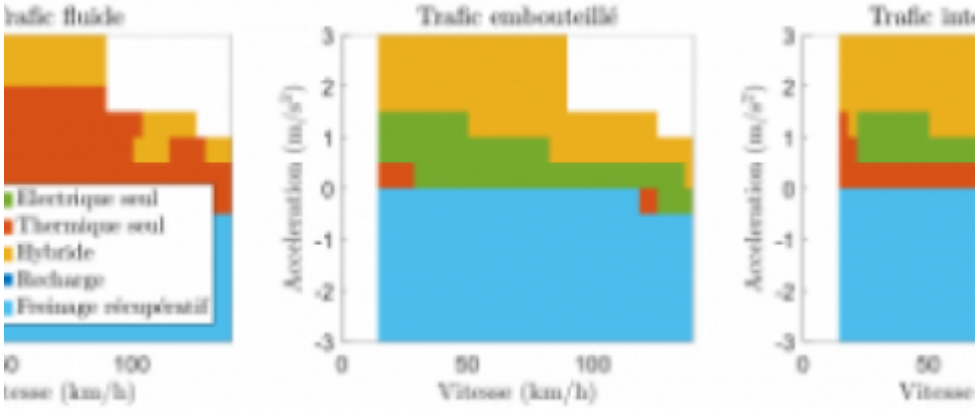


Recherche fondamentale

Actualités mars 2021

Les « Floating Car Data » au service de la qualité de l’air

Sciences de l'ingénieur | Technologie de la combustion et des moteurs | Modélisation et simulation des systèmes | Mathématiques et informatique



Optimisation de la gestion de l’énergie des véhicules hybrides dans le cadre du partenariat avec l’Inria

La collaboration scientifique engagée en 2015 avec l’Inria couvre deux domaines : « **performance numérique et informatique des simulateurs** » et « **commande et optimisation de**

Sciences de l'ingénieur **Systèmes d'automatisation et de contrôle**

Modélisation et simulation des systèmes

VS7 - Limitations de vitesse variables : pour une gestion plus écologique du trafic urbain

Dans le domaine de l'énergie éolienne, les simulations par LES (Large Eddy Simulations[1]) sont couramment utilisées pour mieux appréhender l'écoulement du vent au sein des parcs. A l'échelle de ces parcs, elles servent également à établir des modèles analytiques de sillages, utiles pour étudier l'interaction des éoliennes entre elles ainsi qu'avec la couche limite atmosphérique (CLA). Cependant, les moyens de calcul actuels ne permettent pas une résolution suffisamment fine de ces modèles[2] tout en effectuant des simulations dans des temps acceptables.

Afin de réduire ce coût de calcul, on a déjà recours par exemple aux méthodes actuatrices [1] pour modéliser les pales en s'appuyant sur la technique des « body forces[3] » (actuator lines et actuator disks). Celle-ci permet de limiter la taille de maillage en ne représentant pas explicitement la géométrie des pales. Cependant, la réduction des temps de calcul par LES, bien qu'importante, n'est pas encore suffisante pour la simulation numérique fine d'un parc éolien.

En pratique, cette dernière nécessite de prendre en compte l'interaction entre des phénomènes situés d'une part à une échelle kilométrique (phénomènes atmosphériques) et d'autre part à une échelle métrique (effets de turbulence dans les sillages). C'est cette contrainte qui conduit à des simulations coûteuses, en particulier avec les solveurs LES traditionnels[4] .

Comme alternative à ces solveurs, IFPEN a décidé d'étudier l'utilisation de la méthode Lattice-Boltzmann (LBM), accélérée par l'utilisation des cartes graphiques (GPU[5]). En effet, bien que partant de bases théoriques distinctes de la LES, la LBM peut résoudre des problèmes équivalents et les solveurs basés sur cette méthode sont plus efficaces et particulièrement adaptés aux architectures de calculateurs hétérogènes massivement parallèles.

Ce travail a été mené dans le cadre du projet européen EoCoE-II, achevé fin 2022, en collaboration avec les développeurs du solveur massivement parallèle waLBerla[6], à l'Université d'Erlangen. Sur cette base, IFPEN a développé le solveur waLBerla-wind pour deux architectures de microprocessurs (x86 et ARM). Grâce à sa conception logicielle unique, qui fournit une base de code commune pour CPU et GPU, la portabilité sur les différentes architectures cibles est assurée, avec un coût de maintenance réduit. De plus, ce solveur est compatible avec la technologie GPUDirect® de NVIDIA pour le transfert efficace de données entre plusieurs GPUs.

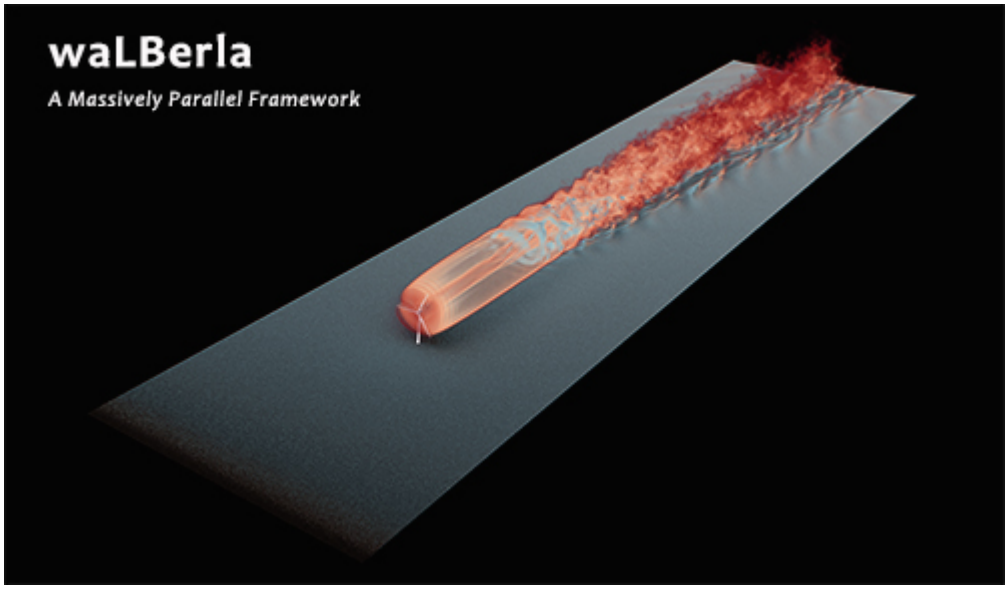
Comme avec la LES, les modèles physiques déployés dans waLBerla-wind pour simuler les éoliennes utilisent des méthodes actuatrices, avec des corrections optionnelles de perte de charge en bout de pale. De plus, ce solveur permet de simuler différentes configurations d'éoliennes, aussi bien à axe horizontal que vertical.

Les résultats numériques et la performance de calcul de waLBerla-wind ont fait l'objet d'une première comparaison [2] avec ceux de SOWFA, le solveur LES le plus utilisé dans la recherche sur l'énergie éolienne, et de Meso-NH, un outil mis au point par IFPEN à partir d'un solveur météorologique développé par le CNRM[7].

Cette comparaison a porté sur un cas test relativement simple, avec une seule éolienne, en appliquant le même pas de temps et la même taille de maille pour les trois solveurs.

Il s'est avéré que sur CPU seul, et pour le même nombre de nœuds de calcul, le solveur LBM de waLBerla-wind était 70 fois plus rapide que SOWFA et 40 fois plus que Meso-NH. En utilisant de plus

les GPUs pour le solveur LBM (Figure 1), les ratios sont encore plus remarquables : 470 et 290 respectivement, tout en fournissant des résultats comparables (Figure 2).



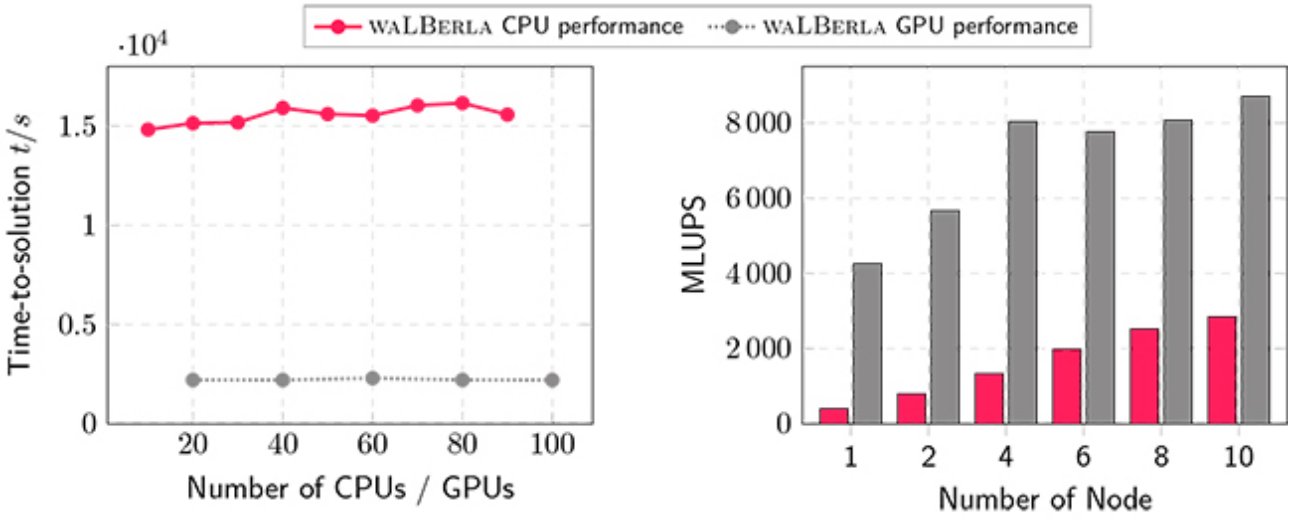


Figure 1 : Champ de vitesse dans le sillage d'une éolienne à axe horizontal (image waLBerla)
et influence du calcul parallèle sur la performance de calcul à cette échelle (graphiques ci-dessus).

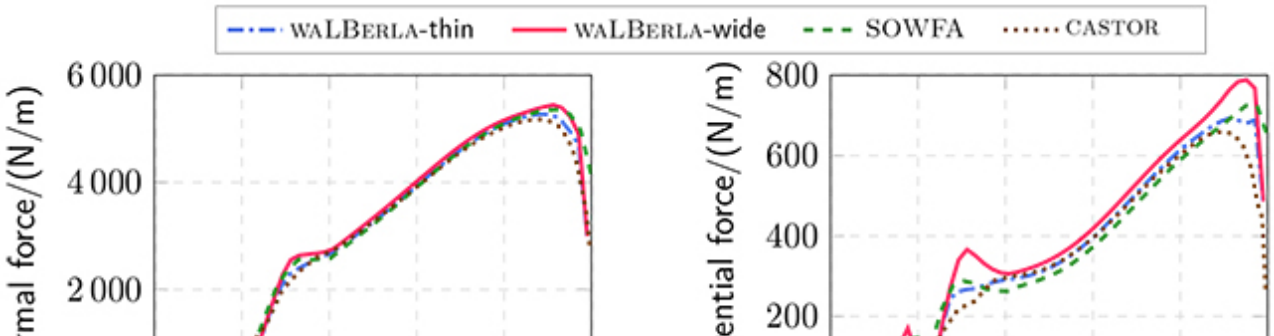


Figure 2 : Distribution des forces normales (à gauche) et tangentielles (à droite) le long de la pale.

Le parallélisme massif déployé dans waLBerla-wind confère à ce code une capacité à simuler efficacement non seulement les éoliennes individuelles mais aussi les parcs éoliens entiers. Le point le plus remarquable est que combiner l'utilisation de la méthode LBM avec le calcul massivement parallèle sur GPUs permet même d'envisager des simulations en temps réel.

L'enrichissement du logiciel pour la prise en compte du phénomène de couche limite atmospherique (CLA) est en cours dans le cadre d'un travail de thèse* pour simuler des parcs éoliens dans des conditions encore plus réalistes.

[1]- Modèle mathématique de turbulence utilisé en dynamique des fluides numérique.
[2]- Cf. Science@ifpen n° 49.
[3]- Forces qui agissent dans tout le volume d'un corps.
[4]- Basés sur les équations de Navier-Stokes.
[5]- Graphics Processing Unit, vs Central Processing Unit (CPU).
[6]- Ce solveur en open-source figure parmi les plus performants à l'heure actuelle grâce, notamment, à l'utilisation de techniques de génération de code très efficaces.
[7]- Centre National de Recherches Météorologiques (Météo France).

* Thèse intitulée : ***Méthodes de Lattice Boltzmann pour application à l'éolien : modélisation aéroélastique d'une éolienne dans une couche limite atmosphérique***.

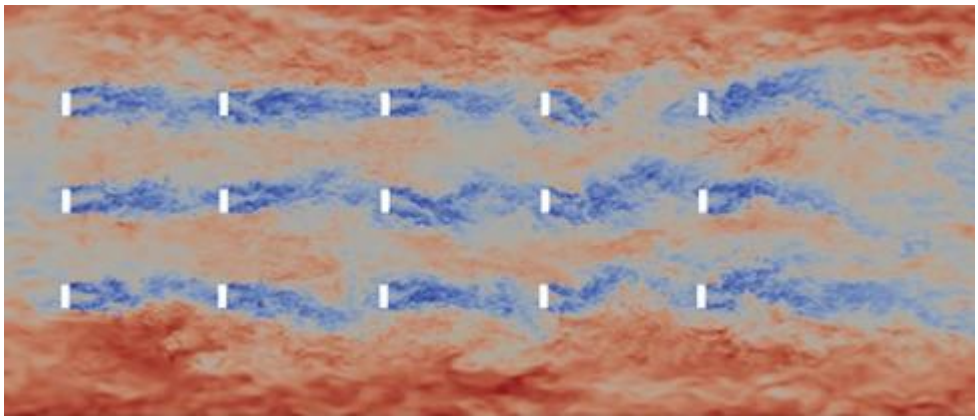
Références :

1. Pierre-Antoine Joulin, ***Modélisation à fine échelle des interactions entre parcs éoliens et météorologie locale***, Thèse de doctorat,
   >> https://www.theses.fr/2019INPT0135

2. Helen Schottenhamml, Ani Anciaux-Sedrakian, Frédéric Blondel, Adria Borras-Nadal, Pierre-Antoine Joulin, and Ulrich Rüde. ***Evaluation of a lattice Boltzmann-based wind-turbine actuator line model against a Navier-Stokes approach***. Journal of Physics: Conference Series, 2265(2):022027, May 2022.
   >> https://hal-ifp.archives-ouvertes.fr/hal-03750519/document

Contacts scientifiques : helen.schottenhamml@ifpen.fr ; Ani Anciaux Sedrakian ; frederic.blondel@ifpen.fr

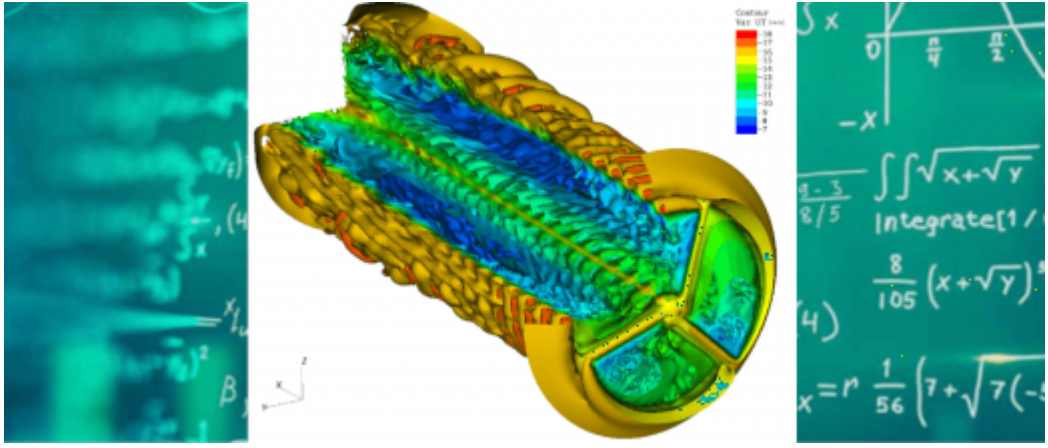
VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



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

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...

Mécanique des fluides | Modélisation et simulation des systèmes

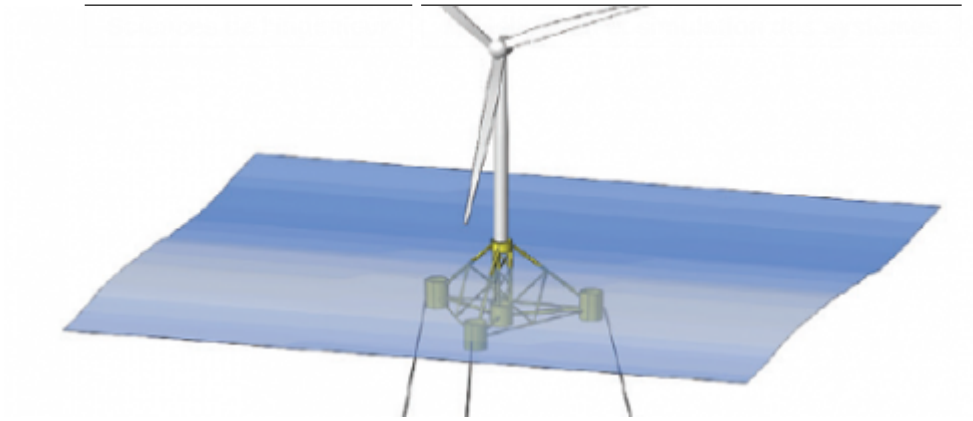


Recherche fondamentale

Actualités septembre 2020

Energie éolienne : un nouvel outil numérique pour l’avenir de la filière

Énergies renouvelables | Énergies éoliennes



Les GPU aident les éoliennes à prendre le large

Depuis plusieurs années, IFPEN s’est lancé dans l’aventure de l’**éolien flottant** et a développé dans ce cadre l’**outil de simulation**

Mathématiques et informatique | Méthodes numériques et optimisation | Conception de logiciels | Calcul de haute performance

VS8 - La simulation des parcs éoliens « massivement » accélérée

La baisse des émissions de CO_2 provenant des véhicules routiers est nécessaire pour réduire durablement les émissions globales de gaz à effet de serre (GES) en France. En effet, le secteur du transport représente encore plus de 30 % de la part des émissions nationales, ce qui en fait le secteur le plus émetteur du pays. Le développement de nouvelles motorisations bas carbone pourrait de plus permettre d'améliorer la qualité de l'air et de diminuer notre dépendance aux énergies fossiles importées.

Afin de comparer les différentes technologies disponibles, matures ou futures, pour le transport routier, IFPEN, avec le soutien de l'ADEME, a réalisé l'étude E4T 2040 de prospective économique et environnementale de ce secteur [1] et développé pour cela des méthodes et des outils permettant de réaliser les analyses requises suivant une approche multi-échelle.

Ces analyses ont dans un premier temps été menées à l'échelle du véhicule, avec l'étude d'une multitude de segments, allant de la citadine au poids lourd articulé, en fonction de plusieurs conditions d'usage mêlant des parcours urbains et extra-urbains. A partir d'hypothèses portant sur l'évolution des technologies de propulsion, les résultats de consommation et d'émission pour chaque type de véhicule ont été déterminés et projetés jusqu'en 2040.

Dans un second temps, ces résultats économiques et environnementaux ont nourri un modèle de choix discrets emboîtés[1], DRIVERS (DiscRete choIce modeling for low-carbon VEhicles fleet scenaRioS), lequel a permis de transposer ces analyses à l'échelle des parcs de véhicules en circulation. Le modèle DRIVERS permet ainsi de réaliser différentes projections de la demande de transport routier, globale ou par type de technologie, en fonction de plusieurs scénarios de politiques publiques, et d'en déduire les émissions polluantes associées.

Cette méthodologie, déployée pour l'étude E4T 2040, a été développée par IFPEN dans le cadre d'un projet de recherche dédié. Pour la partie environnementale, les développements méthodologiques avaient plus particulièrement porté sur les indicateurs Analyses du Cycle de Vie (ACV) liés aux véhicules [2]. Quant au nouveau modèle prospectif de parc DRIVERS, sa fonction d'utilité[2] intègre une première partie liée aux coûts de possession des véhicules et une seconde partie liée aux comportements des agents économiques. Cette seconde partie a bénéficié de travaux plus fondamentaux en économie comportementale [3].

Les résultats obtenus grâce à ces nouvelles approches montrent que les progrès techniques, conjugués à la baisse de coût des solutions électriques (notamment à batterie), vont leur permettre de pénétrer le marché. L'ACV montre qu'avec le mix électrique français le passage aux véhicules électriques à batterie produit des gains très nets d'émissions de GES, les émissions liées à la production des batteries ayant tendance à diminuer d'ici 2040 du fait de la relocalisation de leur production en Europe à cet horizon (Figure 1).

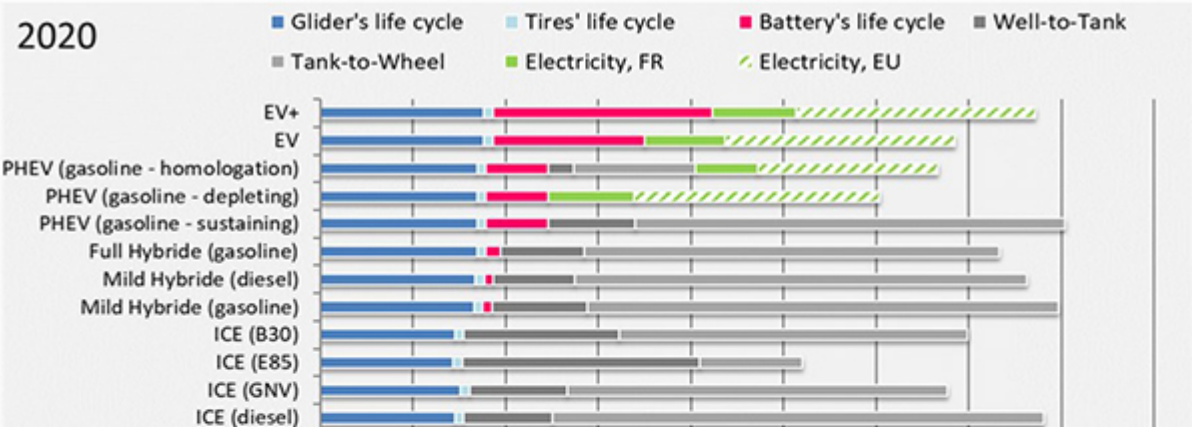


Figure 1 : Impacts potentiels sur le changement climatique pour les véhicules du segment C.
Cycles de conduite WLTC .
Horizons temporels 2020 et 2040 (12 500 km/an)

Enfin, à l'horizon 2050, l'analyse prospective de l'évolution du parc automobile français indique que, même avec le scénario le plus favorable à la vente de véhicules électriques à batterie, les objectifs du ***Green Deal*** (- 90 % d'émissions de CO_2 du parc en 2050 par rapport à 1990) ne peuvent être atteints (Figure 2). Il résulte de ces projections que, sauf utilisation accrue des biocarburants et changements en profondeur des comportements de mobilité *via* des mesures de politiques publiques d'accompagnement adéquates[3], cet objectif de décarbonation affiché pour le secteur des transports sera difficile à atteindre.

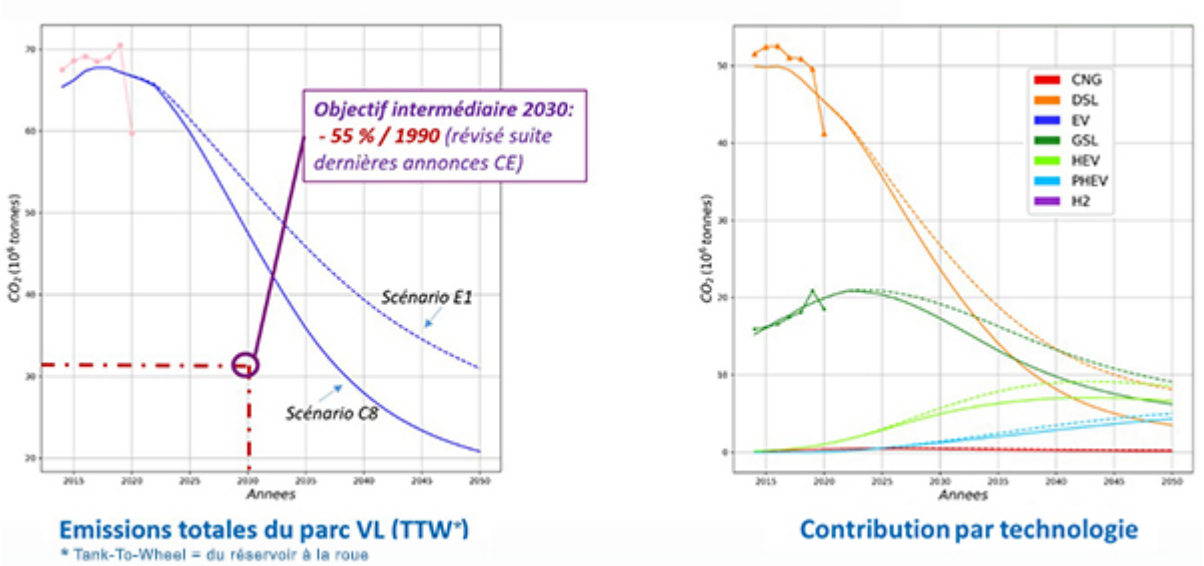


Figure 2 : Évolution temporelle des émissions de CO2 à l'échappement pour le parc des véhicules légers (à gauche), et déclinée par technologie (à droite) pour les scénarios C8 (pro-électriques) avec et sans interdiction de vente des véhicules thermiques après 2035.

[1]- Type de modèle très utilisé en économie du transport pour déterminer la probabilité des usagers à se positionner sur des alternatives, en s'appuyant sur des fonctions d'utilité.
[2]- Fonction mathématique visant à traduire quantitativement le concept d'utilité afin de l'intégrer dans un modèle de choix.
[3]- Autopartage, développement des transports en commun et de l'intermodalité, mobilités douces, etc.

Références :

1. **Etude énergétique, économique et environnementale du transport routier à horizon 2040** (E4T 2040), IFPEN-ADEME, 2022. 126 pages.

>> https://librairie.ademe.fr/mobilite-et-transport/5949-etude-energetique-economique-et-environnementale-du-transport-routier-a-horizon-2040-e4t-2040.html

2. Ternel C., Bouter A., Melgar J., ***Life cycle assessment of mid-range passenger cars powered by liquid and gaseous biofuels: Comparison with greenhouse gas emissions of electric vehicles and forecast to 2030***, Transportation Research Part D, Vol. 97, 2021.
>> https://doi.org/10.1016/j.trd.2021.102897

3. Thèse en cours d'Alexandre Cambo : ***Modélisation de la demande de transport routier européen et de ses impacts environnementaux pour les véhicules particuliers à l'horizon 2040***.

Contacts scientifiques : Benoît Cheze ; xavier.guichet@ifpen.fr ; joris.melgar@ifpen.fr

>> NUMÉRO 51 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités

mars 2023

Des poids lourds qui carburent à l’hydrogène : une solution pour diminuer l’empreinte carbone du transport ?

Motorisations thermiques

Mécanique des fluides | Technologie de la combustion et des moteurs



Recherche fondamentale

Actualités novembre 2020

ECN France : un projet fédérateur pour la mobilité durable

Mobilité durable | Mobilité électrifiée

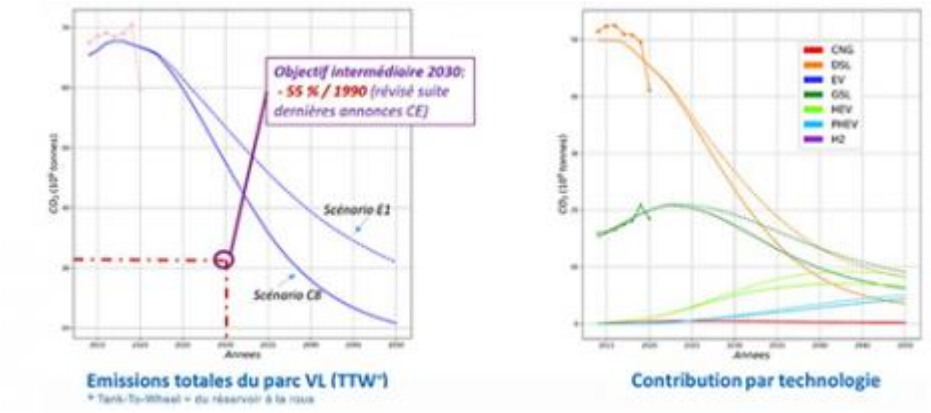


Recherche fondamentale

Actualités septembre 2019

Véhicules électriques : vers une implantation optimisée des stations de recharge

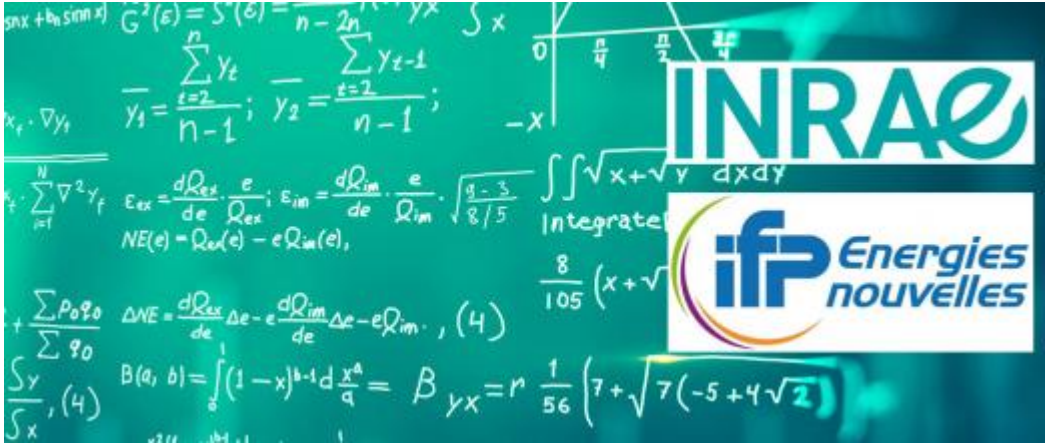
Mathématiques et informatique | Méthodes numériques et optimisation | Économie



VS9 - De nouveaux moyens pour l’analyse prospective du Transport Routier français

La baisse des émissions de CO2 provenant des véhicules routiers est nécessaire pour réduire durablement les émissions globales de gaz à effet de serre (GES) en France. En effet, le secteur du transport représente encore plus de 30 % de la part des émissions nationales, ce qui en fait le secteur le plus émetteur du pays. Le développement de nouvelles motorisations bas carbone pourrait de plus permettre d’améliorer la qualité de l’air et de diminuer notre dépendance aux énergies fossiles importées...

Modélisation économique | Prospective et scénarisation | Évaluation de l'impact environnemental & ACV



Recherche fondamentale

Actualités juillet 2021

L’économie expérimentale au service de la transition écologique : le cas de la réduction des pesticides

Économie | Microéconomie et économétrie | Modélisation économique | Évaluation technico-économique

VS9 - De nouveaux moyens pour l’analyse prospective du Transport Routier français

Numéro 51 de Science@ifpen - Spécial Verrous scientifiques (VS)
14 avril 2023

Lien vers la page web :