Science @ifpen
N° 53 - Novembre 2023

Rédigé le 23 novembre 2023

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



Andreas Ehinger

Directeur de la Formation doctorale

« Le doctorat est victime d'une faible valeur perçue par quasiment toute la société française ». Cette alerte, émise par l'ANRT (Association Nationale Recherche Technologie) dans un récent rapport, est accompagnée d'un autre constat de ce même rapport : *« Le doctorat est stratégique. Il s'inscrit dans une compétition internationale pour les talents qui n'a jamais été aussi forte ».* De la conjugaison de ces deux constats, alarmante pour la France, découle un appel solennel *« Pour un grand plan national pour le doctorat ».*

A IFP Energies nouvelles, nous sommes depuis toujours convaincus non seulement de l'apport indispensable de nos doctorants à l'avancement de la science et à l'élargissement de nos connaissances les plus pointues dans nos domaines de recherche, mais aussi de la nécessité de

former nos doctorants pour les préparer à la prise de responsabilités dans de très nombreux secteurs d’avenir. Notre offre de formation spécifiquement dédiée au doctorat – aux doctorants mais aussi à leurs encadrants – est à la hauteur de cette ambition.

L’excellence scientifique de nos doctorants est reconnue, à travers de nombreux prix et récompenses attribués régulièrement à leurs travaux par les pairs, et par le Prix Yves Chauvin de la meilleure thèse IFPEN.
Dans ce numéro je vous invite à découvrir les sujets soumis cette année à la sélection du Conseil scientifique, à commencer par celui du lauréat, Alexandre Delarouzée.

Vive la science, vive le doctorat !



LES BRÈVES

Thèse d'Alexandre Delarouzée, lauréat du Prix Yves Chauvin 2023 : « ***Ingénierie métabolique de Clostridium acetobutylicum pour l'utilisation de sucres issus de biomasse lignocellulosique*** »

Dans le cadre de la transition énergétique, de nouveaux bioprocédés émergent pour se substituer aux procédés exploitant des ressources fossiles. Ainsi, *Clostridium acetobutylicum* est un micro-organisme capable de convertir, par voie fermentaire, la grande variété de sucres issus des biomasses lignocellulosiques en un panel de molécules biosourcées. Cela en fait donc un candidat potentiel pour produire des biocarburants et/ou des intermédiaires chimiques d'intérêt industriel.

Cette utilisation de *C. acetobutylicum* se heurte cependant à deux limitations. D'une part, l'utilisation par ce micro-organisme de différents sucres est hiérarchisée par un mécanisme dit de « répression catabolique », de telle sorte que ces sucres sont assimilés séquentiellement et non pas simultanément. Cette caractéristique est un frein au développement d'un procédé de fermentation performant et alimenté en continu. D'autre part, l'extraction de ce mélange de sucres fermentescibles nécessite un prétraitement de la biomasse qui génère des composés chimiques toxiques pour le micro-organisme, et impactant de ce fait négativement le procédé fermentaire (figure).

Ce travail de thèse a recouru à différentes approches de génie génétique pour pallier ces deux problèmes. Une série de modifications génétiques a tout d'abord permis de modifier le métabolisme de *C. acetobutylicum* pour qu'il consomme, de manière simultanée, la majorité des sucres issus d'une biomasse lignocellulosique de référence [1]. En parallèle, des méthodes d'évolution adaptative en bioréacteur ont permis d'obtenir des micro-organismes résistants à différents inhibiteurs de croissance et capables de fermenter des substrats industriels de type biomasse prétraitée. Enfin, dans un troisième axe de la thèse, le doctorant a développé un outil génétique qui a permis de lister l'ensemble des gènes indispensables dans le génome de *C. acetobutylicum* [2]. Cette cartographie constitue une base de données cruciale qui permettra de déterminer les cibles génétiques prioritaires en vue de l'amélioration rationnelle de ce biocatalyseur.

Les découvertes réalisées suivant les trois axes explorés permettent d'envisager l'utilisation de *C. acetobutylicum* pour la valorisation efficace de substrats lignocellulosiques afin de produire des molécules biosourcées de deuxième génération en conditions industrielles. Les futurs travaux réalisés au sein du département Biotechnologie d'IFPEN viseront entre autres choses à élargir la gamme de molécules atteignables à l'aide de ce micro-organisme.

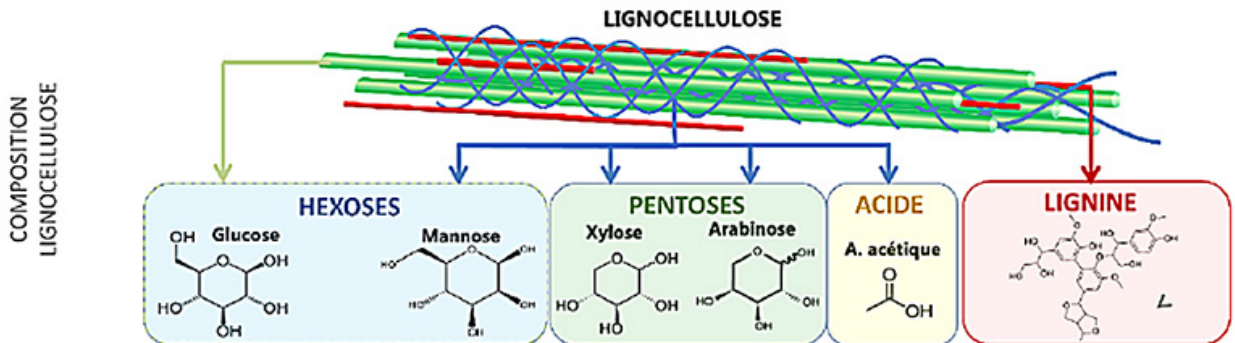


Figure : Composition de la lignocellulose et provenance des inhibiteurs de croissance issus du prétraitement.

Références bibliographiques

1. Delarouzée A, Lopes Ferreira N, Wasels F. (2023). ***Alleviation of Carbon Catabolite Repression through araR and xylR Inactivation in Clostridium acetobutylicum DSM 792***. Applied and Environmental Microbiology, 89(3), e02135-22.
   >> https://doi.org/10.1128/aem.02135-22

2. Delarouzée A, Lopes Ferreira N, Wasels F. ***Gene essentiality in Clostridium acetobutylicum DSM 792***. Submitted to Applied and Environmental Microbiology.

Contact scientifique : francois.wasels@ifpen.fr

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités novembre 2023

Prix Yves Chauvin 2023 : rencontre avec le lauréat, Alexandre Delarouzée

Chimie biosourcée

Microbiologie Génomique

Prix Yves Chauvin : L’ingénierie métabolique au cœur du biosourcé

Thèse d'Erwan Jézéquel : « ***Simulations de sillages d'éoliennes en conditions atmosphériques réelles : des simulations aux grandes échelles aux modèles analytiques*** »

Dans la zone de sillage située derrière chaque éolienne, la vitesse du vent est réduite et la turbulence est augmentée. Il en résulte une réduction de la durée de vie des machines situées en aval ainsi qu'une baisse de la production électrique globale des parcs éoliens.

Pour limiter ces effets et permettre d'optimiser l'implantation des éoliennes dans les parcs, des modèles analytiques de sillages existent dans la littérature mais ils intègrent de nombreuses hypothèses simplificatrices concernant les éoliennes et leur environnement. En particulier, le méandrement[1], schématisé à la figure 1, n'est souvent pas explicitement pris en compte dans les modèles d'écoulement stationnaires et on suppose juste qu'il contribue à l'évolution du sillage de la même manière que de la diffusion. Pourtant, ces oscillations modifient de manière très différente la forme et l'évolution des profils de vitesse et de turbulence. C'est ainsi qu'à cause du méandrement, une éolienne en aval peut se retrouver alternativement à l'intérieur et à l'extérieur d'un sillage émis en amont. Son déficit de vitesse sera moindre que calculé par les modèles stationnaires. En revanche, la turbulence réellement subie, et donc la sollicitation en fatigue, sera supérieure.

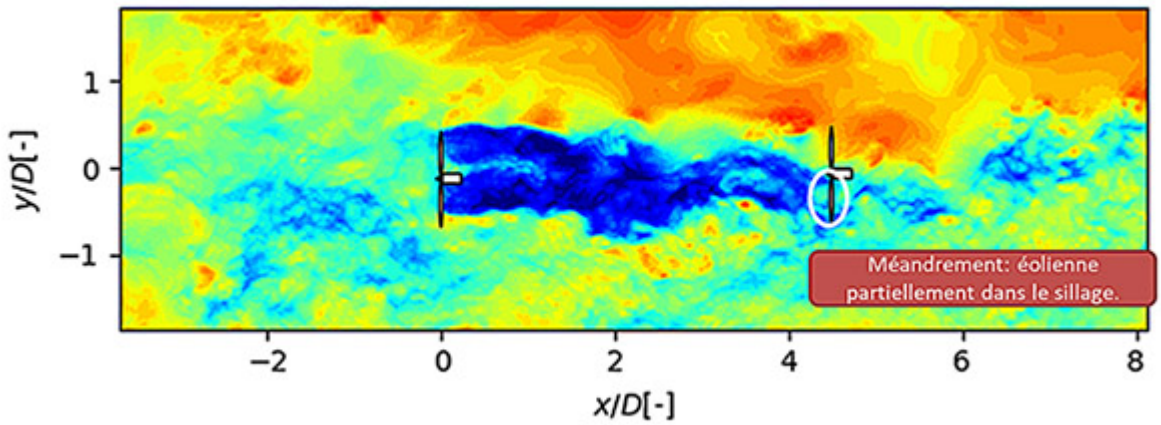


Figure 1 : illustration de l'effet de méandrement du sillage instationnaire sur un cas simulé dans le cadre de la thèse.
Bleu : basses vitesses
Rouge : hautes vitesses
Distances adimensionnées par le diamètre de l'éolienne.

Le méandrement est causé par les grands tourbillons de l'atmosphère et est directement lié à l'état de la couche limite atmosphérique[2] (CLA). L'instabilité de la CLA augmente avec l'importance des phénomènes thermiques ou mécaniques, ayant une conséquence directe sur l'accroissement du méandrement.

Pour simuler directement l'effet de la CLA sur le méandrement (profils de vent et turbulence), on a le recours à un code numérique (Meso-NH) développé par le Centre National de Recherches

Météorologique et le Laboratoire d'Aérologie. Ce code à haute-fidélité, basé sur les équations de Navier-Stokes, a été spécifiquement créé pour modéliser les phénomènes au sein de la CLA et ses résultats ont donc pu nous servir de référence. Nous avons ainsi pu simuler de manière fiable le sillage d'une éolienne seule dans un cas stable, instable ou intermédiaire. Cela nous a permis de démontrer des résultats communément admis de la littérature tout en explicitant certaines hypothèses sous-jacentes qui sont rarement détaillées [1].

Les résultats obtenus ont tout d'abord confirmé que la forme du profil de turbulence dans le sillage d'une éolienne est influencée par le méandrement et que, par rapport à une situation neutre, l'instabilité de la CLA fait rapidement évoluer le profil d'une forme bimodale vers une forme unimodale.

Ils ont ensuite débouché sur la proposition d'un nouveau modèle analytique pour décrire la turbulence dans le sillage d'une éolienne en tenant compte du méandrement [2]. Il s'agit du premier modèle analytique basé sur la physique et non sur une approche entièrement empirique pour prédire un profil de turbulence ajoutée.

La figure 2 illustre le fait que le modèle analytique élaboré au cours de ce travail (en bleu) permet de bien retrouver les différents profils simulés avec Meso-NH, contrairement aux modèles de la littérature (exemple en rouge), lesquels prédisent systématiquement une forme bimodale car calibrés sur des cas neutres.

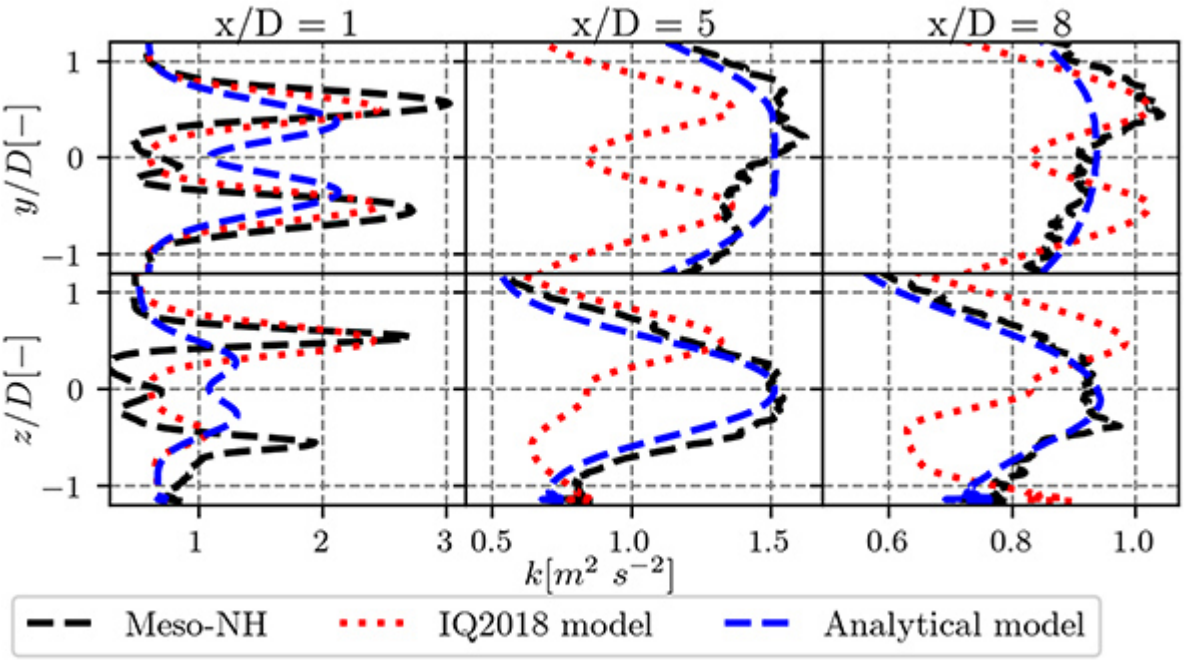


Figure 2 : Profils horizontaux (haut) et verticaux (bas) de la turbulence à trois positions derrière l'éolienne (distance x normalisée par rapport au diamètre D de la machine).
Noir : Meso-NH
Rouge : modèle analytique de la littérature
Bleu : modèle analytique proposé

Pour poursuivre ces travaux, une calibration du modèle va être proposée, basée sur d'autres simulations haute-fidélités de Meso-NH. Cela permettra de prédire de manière précise les profils de

turbulence en fonction des conditions atmosphériques tout en gardant des coûts de calculs extrêmement réduits.

1- Forme oscillante des sillages.
2- Partie la plus basse de l'atmosphère, au contact de la surface planétaire, et dont le comportement est directement influencé par le frottement avec cette dernière.

Références bibliographiques

1. Erwan Jézéquel, Frédéric Blondel, Valéry Masson 2022. ***Breakdown of the velocity and turbulence in the wake of a wind turbine – Part 1: large eddy simulations study***, Wind Energy Science, 2022-46.
   >> https://doi.org/10.5194/wes-2022-46

2. Erwan Jézéquel, Frédéric Blondel, Valéry Masson 2022. ***Breakdown of the velocity and turbulence in the wake of a wind turbine – Part 2: analytical modeling***, Wind Energy Science, 2022-47.
   >> https://doi.org/10.5194/wes-2022-47

Contact scientifique : erwan.jezequel@ifpen.fr

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

Modéliser les sillages des éoliennes : une question d'atmosphère !

Thèse de **Flavia Domingues de Souza** : « ***Étude et modélisation d'une Machine à Mémoire de Flux Variable à base des aimants Fe-Cr-Co pour son alimentation et sa commande sans capteur mécanique à haute vitesse.*** »

Les Machines Synchrones à Aimants Permanents (MSAPs) sont une technologie de référence pour la propulsion des véhicules électriques. Toutefois, leur déploiement à très grande échelle est subordonné à des contraintes relatives aux aimants :

- **la capacité d'approvisionnement en ressources** (notamment les terres rares) , car 40 % des matières premières nécessaires à leur production est située en Chine ;
- **mais aussi les défis environnementaux liés à l'extraction minière, au recyclage et au raffinage.**

En outre, les MSAPs nécessitent souvent des stratégies de défluxage[1] pour fonctionner à hautes vitesses, ce qui peut entraîner des pertes énergétiques, et donc des baisses de rendement du système global.

Les Machines à Mémoire de Flux Variable (MMFVs) constituent une technologie alternative qui exploite des aimants dits « à faible champ coercitif », à base d'alliage Fe-Cr-Co. Encore peu exploité pour ces applications, cet alliage est avantageux de par sa faible teneur en cobalt (matériau critique) et sa bonne résistance mécanique. De plus, le contrôle des MMFVs présente un degré de liberté supplémentaire car leur flux magnétique peut être régulé par de très courtes impulsions de courant de magnétisation.

Les travaux de cette thèse ont visé à caractériser et comprendre le comportement du Fe-Cr-Co dans les conditions opératoires envisagées. Pour ce faire, la configuration étudiée a été celle d'une MSAP, où le rotor à aimant permanent a été remplacé par un cylindre massif de cet alliage, géométrie simple et adaptée aux applications hautes vitesses. L'étude expérimentale s'est déroulée en deux étapes :

1. la magnétisation à l'arrêt, par l'injection de courants dans le bobinage statorique à vitesse nulle, qui vise à caractériser l'aimant inséré dans l'environnement machine ;
2. la magnétisation en dynamique (moteur tournant), dans laquelle l'état de magnétisation est ajusté en cours de pilotage du moteur électrique, et qui sert au contrôle de son couple électromagnétique.

La première étape s'est appuyée sur les équations qui décrivent les points de fonctionnement dans la courbe d'hystérésis et relient l'intensité du champ magnétique H à la densité de flux magnétique B [1]. Deux méthodologies ont été proposées et déployées pour décrire le profil d'aimantation du Fe-Cr-Co à l'arrêt, selon qu'on se situe dans sa direction d'aimantation facile ou difficile. Les caractéristiques

magnétiques du cylindre ont été déduites à la fois des tests à l'arrêt et de simulations par éléments finis et les résultats ont été comparés aux références fournies par un équipement de mesure idéal (HysteresisGraph), qui caractérise l'aimant hors environnement machine. La figure 1 présente les différences constatées, discutées dans [2], dont les études réalisées par simulation numérique ont permis de conclure qu'elles sont liées à la géométrie et à la saturation du matériau constituant le stator.

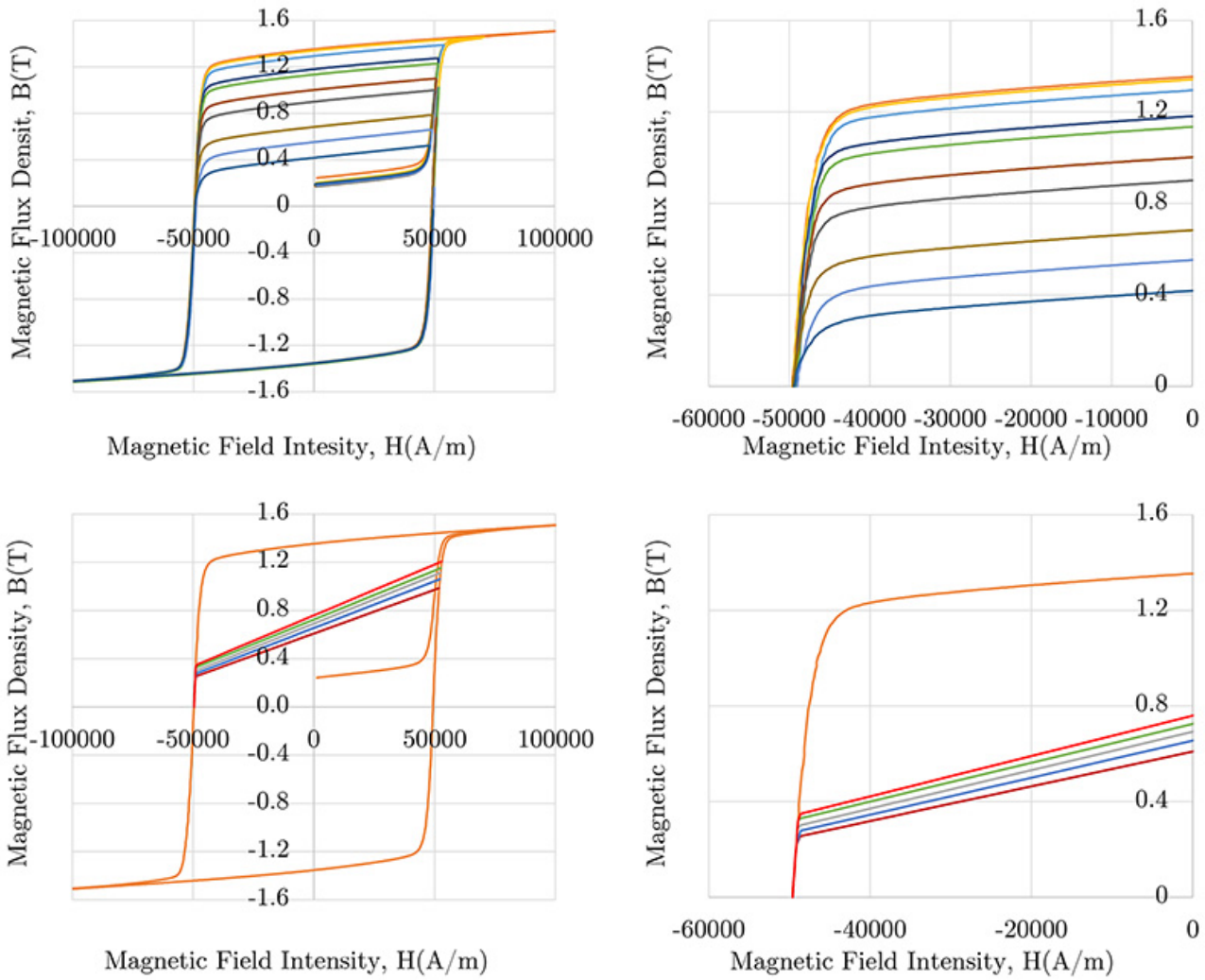


Figure 1 – Cycles d'hystérésis obtenus
Graphiques de la ligne 1 : à partir des mesures HysteresisGraph
Graphiques de la ligne 2 : à partir des tests expérimentaux et des simulations par éléments finis

La seconde étape, sur la magnétisation et le contrôle en dynamique du couple électromagnétique du moteur, a permis de développer un algorithme de commande sans capteur de position au rotor, adapté de travaux antérieurs [3]. Ce système estime la position et la vitesse du rotor à l'aide des tensions de sortie mesurées, en tenant compte de la compensation des retards de phase. Ceux-ci étant fortement influencés par les inductances des axes direct et en quadrature (axes dq)². Une méthodologie utilisant des simulations FEA a été proposée pour les estimer, en tenant compte des effets d'anisotropie de l'aimant et de la saturation du fer au niveau du stator.

Un résultat important de ce travail a trait aux états de magnétisation partielle de l'aimant, lesquels émanaient des essais de magnétisation à l'arrêt, et ont ensuite permis de prédire les points de fonctionnement attendus en dynamique. Le modèle magnétique de l'aimant issu des essais a servi également de base pour l'analyse des inductances de la machine, informations nécessaires pour optimiser le contrôle du système visant à maximiser le couple généré par la machine.

Une autre conclusion apportée concerne la démonstration de l'influence de la géométrie de la machine électrique (design des encoches, longueur de l'aimant, etc.) sur l'état de magnétisation attendu par un aimant inséré dans une MMFV.

Ces travaux ouvrent ainsi la voie à d'autres études scientifiques visant à améliorer la conception géométrique d'un stator adapté et optimisé pour les propriétés des aimants Fe-Cr-Co.

[1-] Le défluxage d'une machine tournante consiste à diminuer le flux inducteur pour augmenter sa vitesse au-delà de sa valeur nominale sans augmenter la tension d'alimentation
[2-] Axes associés au changement du repère réel triphasé de la machine par un repère tournant fixé au rotor, afin de rapprocher le modèle d'une machine AC à celui d'une machine DC, ce qui permet de contrôler indépendamment le flux et le couple dans la machine (commande vectorielle).

Références bibliographiques

1. F. D. de Sousa, A. Battiston, S. Pierfederici and F. Meibody-Tabar, ***Validation of the standstill magnetization strategy of a FeCrCo-based Variable Flux Memory Machine***, 2021 24th International Conference on Electrical Machines and Systems (ICEMS), Gyeongju, Korea, Republic of, 2021, pp. 536-541.
   >> doi: 10.23919/ICEMS52562.2021.9634323

2. F. D. de Sousa, A. Battiston, F. Meibody-Tabar and S. Pierfederici, ***Evaluation of the Magnetic Behavior of a Single Pole Pair Fe-Cr-Co-based Memory Motor Considering a Standstill Magnetization***, in IEEE Transactions on Magnetics, vol. 58, no. 8, pp. 1-7, Aug. 2022, Art no. 8202607.
   >> doi: 10.1109/TMAG.2022.3141895

3. N. Haje Obeid and A. Battiston, ***Model based angle compensation method for sensorless control of a wide range high speed PMSM***, IECON 2019 - 45th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society, Lisbon, Portugal, 2019, pp. 2701-2706.
   >> doi: 10.1109/IECON.2019.8926751

Contact scientifique : alexandre.battiston@ifpen.fr

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

Une histoire d’aimants pour les futures générations de véhicules électriques

Thèse d'**Adam Hammoumi** : « ***Analysis-Driven Design of Digital Multi-scale Microstructures of Materials*** »

Alors que les modèles macroscopiques couplés à l'analyse expérimentale de la porosité sont bien établis pour des pores de géométrie simple, les microstructures hiérarchisées et désordonnées défient les cadres existants et remettent en question les interprétations classiques. Nous avons proposé un cadre numérique pour contribuer à la résolution de ce défi, tenant compte à la fois de la morphologie, de la connectivité, et de la distribution en taille des pores.

Sur la base de jumeaux numériques réalistes, notre stratégie a tout d'abord permis de reproduire fidèlement les résultats des techniques de caractérisation de la porosité [a]. De nouveaux modèles pour la simulation numérique ont par ailleurs permis de faire le lien entre des phénomènes physico-chimiques et les propriétés géométriques des microstructures [b]. Enfin, les calculs réalisés sur la base de ces modèles ont été accélérés d'un facteur 30 par l'apprentissage profond (exemple figure 1), grâce à notre modèle auto-encodeur rendant possible, pour de grands volumes, une simulation précise de la mésoporosité à l'échelle du nanomètre [c].

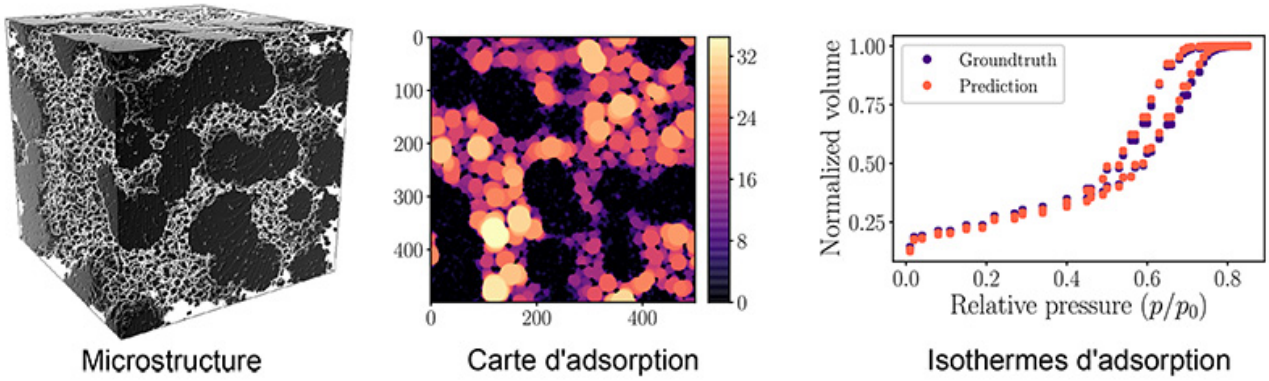


Figure 1 : Illustration d'une microstructure simulée, de sa carte d'adsorption issue du modèle morphologique, et comparaison entre l'isotherme réelle (Groundtruth) et l'isotherme obtenue par Deep Learning (Prediction).

Les résultats de ce travail de thèse sont très encourageants et la plateforme de simulation développée ouvre également la voie à des tests virtuels pour reproduire des opérations sur les matériaux, comme par exemple le broyage, et donner accès à une vision inédite des transformations internes subies par les microstructures à cette occasion.

Au-delà des processus habituels de modélisation microscopique et de caractérisation expérimentale des microstructures de matériaux poreux, la démarche entreprise ambitionne d'établir un nouveau cadre numérique, rapide et adaptatif, pour :

- comprendre les relations entre les propriétés texturales et les propriétés d'usage des matériaux poreux complexes ;

- être en capacité d’obtenir « à haut débit » des résultats expérimentaux simulés.

[a]- https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/breve/conception-numerique-axee-lanalyse-microstructures-multi-echelles-materiaux-poreux
[b]- https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/breve/vs4-nouvelle-voie-numerique-caracterisation-materiaux-poreux-virtuels
[c]- https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/breve/segmentation-semantique-apprentissage-profond-en-sciences-des-materiaux

---

Références bibliographiques

1. A. Hammoumi, M. Moreaud, D. Jeulin, E. Jolimaitre, T. Chevalier, L. Sorbier, M.Klotz and A. Novikov. ***A novel physisorption model based on mathematical morphology operators preserving exact pore morphology and connectivity. Microporous and Mesoporous Materials***, Volume 337, 2022.
   >> https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2022.111847

2. A. Hammoumi, M. Moreaud, C. Ducottet and S. Desroziers. ***Adding geodesic information and stochastic patch-wise image prediction for small dataset learning***. Neurocomputing, Volume 456, 2021.
   >> https://doi.org/10.1016/j.neucom.2021.01.108

3. A. Hammoumi, M. Moreaud, E. Jolimaitre, T. Chevalier, A. Novikov and M. Klotz. ***Efficient Pore Network Extraction Method Based on the Distance Transform***. In Lecture Notes in Networks and Systems, vol 144. Springer, Cham. Proceedings of the Artificial Intelligence and Industrial Applications conference (A2IA 2020),
   >> http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-53970-2_1

4. A. Hammoumi, M. Moreaud, E. Jolimaitre, T. Chevalier, A. Novikov and M. Klotz. ***Graph-Based M-tortuosity Estimation***. In Lecture Notes in Computer Science, vol 12708. Springer, Cham. Proceedings of the Discrete Geometry and Mathematical Morphology conference (DGMM 2021).
   >> http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-76657-3_30

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

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

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

Matériaux poreux numériques : du virtuel à l’intérêt bien réel !

Thèse de **Loïc Iapteff** : « ***Transfer Learning for Smart Predictive Analytics*** »

IFPEN est un leader mondial dans le développement de catalyseurs et de procédés pour la production de carburants propres. Pour que ces procédés soient eux-mêmes éco-efficients[1], il est nécessaire d'optimiser le couplage des catalyseurs avec les conditions opératoires, en fonction des charges utilisées et des spécifications recherchées pour les produits raffinés. Il est dès lors utile de pouvoir s'appuyer sur des modèles prédictifs quant aux performances atteintes et le recours à l'apprentissage (Machine learning) est une option intéressante dans ce cas.

Pour chaque procédé et chaque nouveau catalyseur, le modèle doit être entraîné avec des données expérimentales acquises sur des installations pilotes. L'exploitation de ces installations est longue et coûteuse, d'où un intérêt à réduire drastiquement le volume de données expérimentales nécessaires pour la mise au point des nouvelles générations de catalyseurs, tout en conservant la qualité des modèles prédictifs. C'est là qu'intervient l'apprentissage par transfert (transfer learning), approche consistant à pré-entraîner un modèle sur un domaine similaire, puis à l'adapter à une problématique spécifique, de manière à tirer parti de connaissances déjà acquises.

Des techniques de type bayésien[2] ont été mises en œuvre dans le cadre de cette thèse pour transférer différents types de modèles [1, 2], avec comme avantage principal, la réduction du nombre d'observations nécessaires pour obtenir une nouvelle modélisation efficace. Ceci est illustré à la Figure 1 relative à la teneur en azote pour le procédé de prétraitement en hydrocraquage : on observe l'efficacité du transfert bayésien par rapport au simple ajout de données et ce d'autant plus que le nombre de données rajoutées est faible.

Cette méthodologie d'apprentissage par transfert a permis de diminuer de manière importante (30 %) le nombre de points expérimentaux nécessaire pour optimiser des modèles relatifs au procédé d'hydrotraitement sur de nouvelles générations de catalyseurs. Ces travaux ont d'ores et déjà été étendus à d'autres cas d'application et pas moins de cinq projets de recherche en ont bénéficié pour accélérer la mise à disposition de nouveaux modèles et la réduction de leurs coûts d'accès.

Pour l'élaboration ou l'amélioration de modèles prédictifs dans le secteur industriel, il est nécessaire de disposer d'un grand nombre de données. La tendance actuelle est d'en produire de nouvelles. Notre travail pourra permettre de contrecarrer cette tendance grâce à une méthode innovante et efficiente. Celle-ci conduira à modéliser un phénomène à partir d'une quantité réduite de données expérimentales et en exploitant au maximum des connaissances antérieures.



Figure 1 : Evolution de la qualité de la prédiction de la teneur en azote (score = erreur moyenne absolue) en fonction du nombre de points utilisés (sample size) avec un transfert bayesien (bleu) et sans transfert (orange).

1- L'éco-efficience exprime le lien entre le bénéfice économique et l'impact environnemental causé.
2- Approches statistiques fondées sur l'inférence bayésienne, où la probabilité exprime un degré de croyance en un événement.

Références bibliographiques

1. L. Iapteff, J. Jacques, M. Rolland, B. Celse, ***Reducing the Number of Experiments Required for Modelling the Hydrocracking Process with Kriging Through Bayesian Transfer Learning***, Journal of the Royal Statistical Society Series C Applied Statistics, 70(5), July 2021 >> DOI: 10.1111/rssc.12516

2. L. Iapteff, J. Jacques, V. Costa, B. Celse, ***Reducing the Number of Experimental Points to Fit Kinetic Models: A Bayesian Approach***, July 2023 >> DOI: 10.1021/acs.iecr.2c03862

Contact scientifique : victor.costa@ifpen.fr

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

L'apprentissage par transfert de connaissance pour l'optimisation des procédés

Thèse de **Jingang Qu** : « ***Acceleration of Numerical Simulations with Deep Learning: Application to Thermodynamic Equilibrium Calculations*** »

La simulation du transport réactif de fluides a de multiples applications - écoulements en milieu poreux, combustion, génie des procédés - et requiert des calculs d'équilibre thermodynamique (aussi appelés calculs « flash »). Cependant, ces calculs peuvent avoir des durées importantes et, comme ils interviennent en grand nombre dans les simulations réalisées, ils limitent en pratique ces dernières à des systèmes contenant peu d'espèces chimiques ou à des échelles de temps et d'espace restreintes.

Le travail mené au cours de cette thèse a consisté à accélérer les flashs diphasiques en intégrant des modèles d'apprentissage profond dans l'algorithme de flash existant [1]. Par ce moyen, on visait une accélération de la convergence de l'algorithme et donc une réduction du temps de calcul, sans remettre en cause l'exactitude de la solution.

C'est ce qui a été obtenu, avec une accélération d'un facteur 6 sur les architectures informatiques mono-cœur existantes [2, 3]. De plus, la fourniture d'un algorithme parallèle pouvant fonctionner sur les architectures matérielles de type GPU[1] a conduit à des gains de temps d'un facteur 100 (figure 1).

Les perspectives de poursuite sont nombreuses car l'implémentation dans les simulateurs de transport réactif industriels requiert des évolutions importantes pour adapter les codes aux architectures matérielles utilisées. De plus, l'extension de ces travaux de recherche aux flashs triphasiques ainsi qu'à des modèles d'équation d'état plus complexes est à l'étude. Ceci permettra de modéliser une gamme plus vaste d'interactions chimiques, et notamment en ce qui concerne les systèmes aqueux.

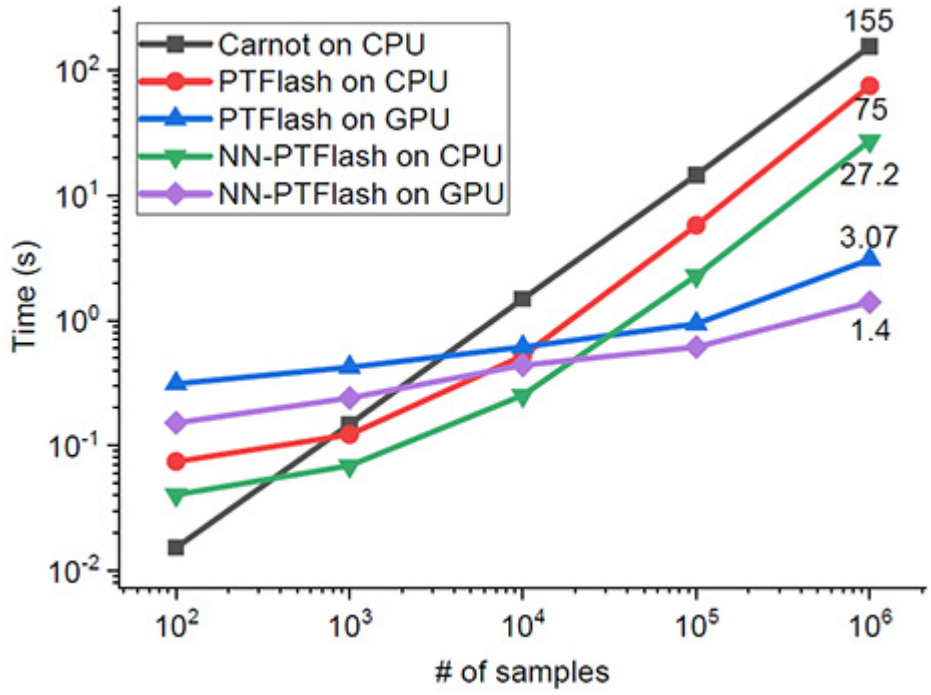


Figure 1: Comparaison des temps de calcul entre CARNOT[2] et l'algorithme PTFlash intégrant les modèles d'apprentissage pour un mélange de 9 espèces chimiques.

1- Unité de traitement graphique (Graphics Processing Unit)
2- Librairie IFPEN implémentant l'algorithme classique

Références

1. https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/breve/des-flashs-plus-rapides-grace-lapprentissage-profond

2. Jingang Qu, Thibault Faney, Jean-Charles de Hemptinne, Soleiman Yousef, Patrick Gallinari, ***PTFlash: A vectorized and parallel deep learning framework for two-phase flash calculation***, Fuel, Volume 331, Part 1, 2023.
   >> https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125603

3. Jingang Qu, Thibault Faney, Jean-Charles de Hemptinne, Soleiman Yousef, Patrick Gallinari, ***HMOE: Hypernetwork-based Mixture of Experts for Domain Generalization***, arXiv, soumis à ICCV 2023.
   >> https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.08253

Contact scientifique : thibault.faney@ifpen.fr

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

La thermodynamique fait son apprentissage… profond

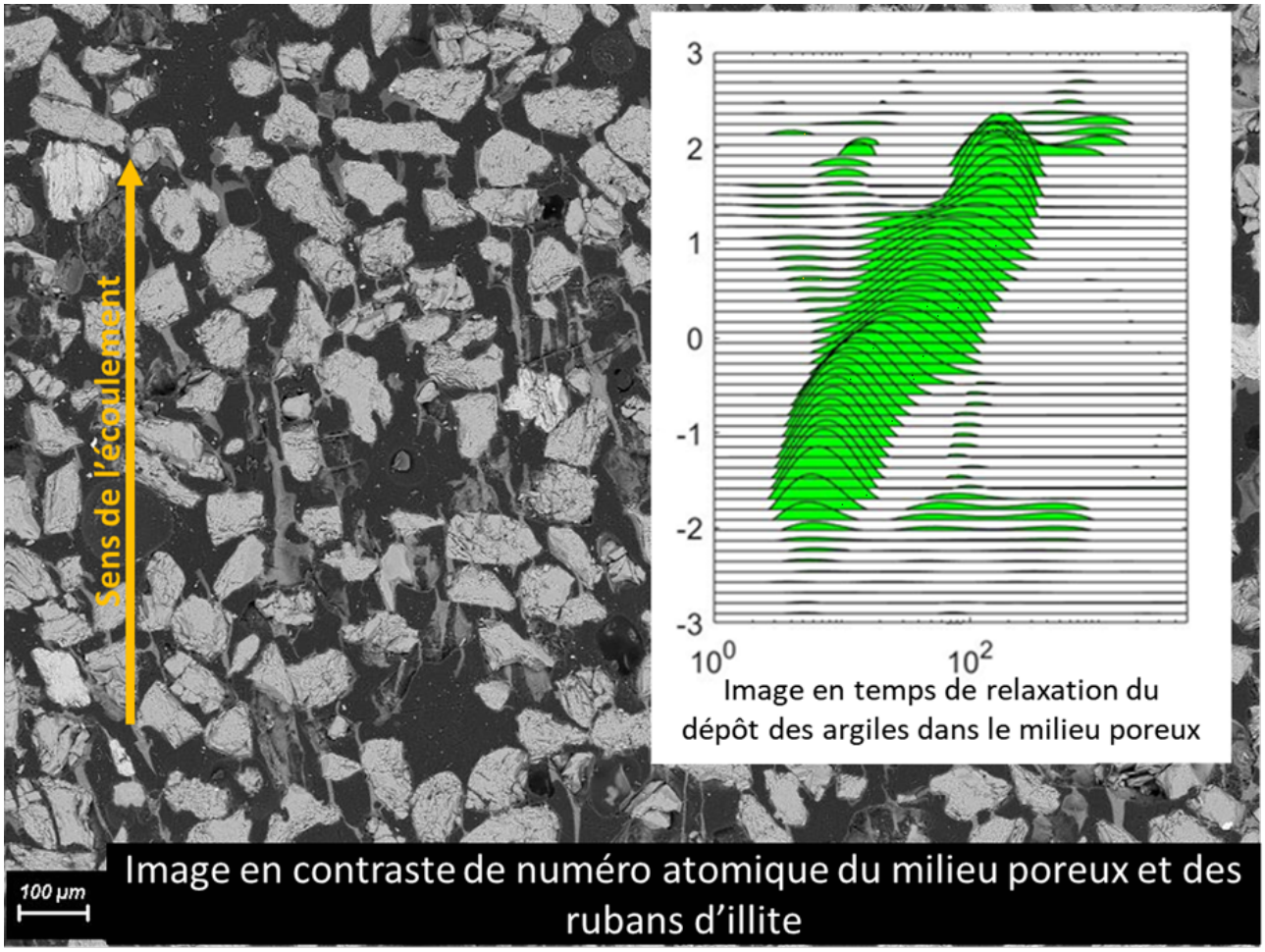
Thèse d'**Inès Raies** : « ***Identification et compréhension des mécanismes de déstabilisation colloïdale dans les procédés géothermiques*** »

Dans une structure géologique poreuse, l'écoulement d'un fluide géothermal entraîne des particules solides pour lesquelles les roches agissent comme un filtre. La capture de ces particules cause alors une réduction progressive de la perméabilité du milieu poreux, pouvant conduire à une réduction drastique de l'injectivité et à un éventuel échec de l'opération industrielle.

Afin d'apporter une meilleure compréhension des mécanismes à l'œuvre, le travail doctoral s'est organisé autour de trois axes [1, 2] :

1. Identification des argiles responsables du colmatage ;
2. Etude de la stabilité des argiles dans les conditions de la géothermie ;
3. Etude de la baisse d'injectivité par dépôt de particules d'argiles dans les milieux poreux.

Le couplage de la RMN et du MEB a permis de mieux qualifier l'altération à l'échelle micrométrique du réseau poreux et d'apporter les éléments nécessaires à l'interprétation des pertes de charge mesurées en écoulement, permettant ainsi de mieux contraindre la modélisation numérique prédictive du phénomène.



>> Plus d'information

Références bibliographiques

1. ***Formation damage induced by clay colloids deposition in Triassic clastic geothermal fields: Insights from an experimental approach***, 2023, Raies Ines, Kohler Eric, Fleury Marc, Pédel Nicolas, Ledésert Béatrice, Applied Clay Science 234, 106868
   >> DOI: https://doi.org/10.1016/j.clay.2023.106868

2. ***Clay-induced permeability decline in sandstone reservoirs: Insights from a coupled NMR-SEM experimental approach*** (2023) Raies Ines, Fleury Marc, Kohler Eric, Pédel Nicolas, Ledésert Béatrice, Geothermics 114, 102784
   >> DOI: https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2023.102784

Contact scientifique : eric.kohler@ifpen.fr

>> NUMÉRO 53 DE SCIENCE@IFPEN

Le phénomène de colmatage est un enjeu fort pour la géothermie

Numéro 53 de Science@ifpen - Travaux de doctorants et prix Yves Chauvin
23 novembre 2023

Lien vers la page web :