Science @ifpen
N° 54 - Mars 2024

Rédigé le 28 mars 2024

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



Cécile Barrère-Tricca
Directrice du Centre de Résultats R&I « Chimie pour l'Industrie »

Acteur engagé pour accélérer la transition écologique, IFPEN a pour mission d'innover pour un monde décarboné et durable, en proposant des solutions technologiques aux défis sociétaux.

C'est en s'appuyant sur une **recherche fondamentale** structurée, construite en continuité et en synergie avec les problématiques appliquées, que ces solutions innovantes pourront émerger. C'est la raison pour laquelle notre recherche fondamentale est aujourd'hui organisée autour de neuf verrous scientifiques (VS) qui alimentent le **processus d'innovation IFPEN** tout en **anticipant les besoins**

futurs.

Dans ce numéro, chacun des 9 verrous est illustré par un fait marquant et l'ensemble met en lumière le cheminement scientifique allant de la compréhension de phénomènes physiques complexes (expérimentation, acquisition de données) à l'évaluation d'un système complet (impacts économiques et environnementaux) en passant par une description (modélisation) et une représentation numérique (simulation) de ces phénomènes.

Tous ces résultats scientifiques sont précieux pour accélérer l'innovation, et certains en particulier au service d'une industrie décarbonée et circulaire :

- Les approches méthodologiques « in situ et/ou operando » développées permettront d'identifier les propriétés d'un catalyseur hétérogène et leur évolution au cours de son cycle de vie, y compris en fonctionnement !

- L'identification d'un paramètre de contrôle unique permettra, à l'échelle du laboratoire, de savoir exactement quelles conditions opératoires de malaxage appliquer pour fabriquer une pâte de porosité choisie, et de conduire à une conception optimisée des supports de catalyseur en fonction de chaque application visée.

Bonne lecture !

Cécile Barrère-Tricca

> Liste des 9 verrous scientifiques (VS)

LES BRÈVES

Les catalyseurs hétérogènes sont des matériaux qui rendent chimiquement possibles et économiquement viables d'innombrables procédés industriels au service de problématiques énergétiques et environnementales, comme par exemple la production de carburant et la qualité de l'air (véhicules, bâtiments). Leur mise en œuvre se confronte à deux enjeux scientifiques majeurs :

1) l'identification des propriétés chimiques, structurales et morphologiques d'un catalyseur optimal[1],

2) l'évolution de ces propriétés au cours du cycle de vie du catalyseur (synthèse, mise en forme, utilisation, recyclage).

Afin de progresser sur ces enjeux, la caractérisation du matériau dans tous ses états successifs, et y compris en cours de fonctionnement, est un axe fort de progrès, ainsi qu'un véritable défi expérimental.

Dans cette perspective, les approches méthodologiques « in situ[2] et/ou operando[3] » permettent d'étudier l'évolution d'un matériau et de son environnement fluide dans des conditions physico-chimiques représentatives d'une étape de fabrication ou d'un réacteur catalytique. Elles présentent donc un avantage remarquable par rapport aux approches dites ex situ, qui se limitent à l'observation finale et hors-contexte de tout ou partie d'un mécanisme complexe de transformation.

Dans le cadre de travaux de recherche collaboratifs, IFPEN a contribué au développement et à la mise en œuvre de telles approches, illustrées par les trois exemples suivants :

En vue d'améliorer la fabrication du catalyseur

L'imagerie hyperspectrale d'absorption de rayons X synchrotron en conditions d'imprégnation/maturation/séchage a été développée sur la ligne de lumière ROCK du Synchrotron SOLEIL de Gif-sur-Yvette (figure 1). Il a ainsi été possible de suivre :

- la mobilité et la spéciation chimique[4] des différentes espèces catalytiques (ici molybdiques) d'une solution d'imprégnation dans des extrudés d'alumine mésoporeuse (le support) ;
- l'évolution de ces espèces au cours du séchage, avec une résolution temporelle et spatiale pertinente vis à vis des phénomènes observés (respectivement de l'ordre de la minute et d'une dizaine de µm).

Grâce à cela, des éléments de compréhension de l'hétérogénéité de répartition et de la nature des précurseurs de phase active dus à l'imprégnation et au séchage ont pu être proposés [1].

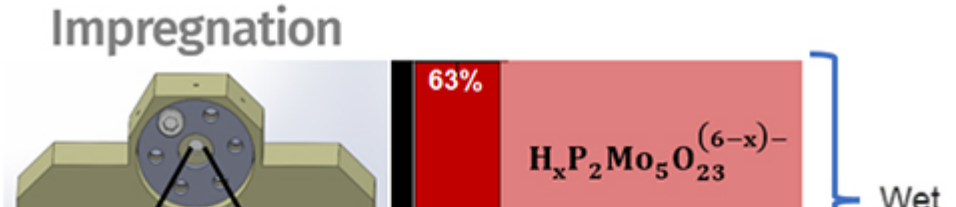


Figure 1 : Dispositif d'imprégnation/séchage adapté à la ligne de lumière ROCK pour le suivi in-situ par spectroscopie d'absorption de rayons X. Les contributions spectrales de différentes espèces de molybdène issue du modèle chimiométrique sont indiquées.

Autre exemple[5], la mise en œuvre de conditions hydrothermales en MET[6] environnemental a permis d'investiguer la désalumination, par hydrolyse, de zéolithes faujasites pour la fabrication de catalyseurs acides [2]. Ce développement s'est fait en parallèle de l'étude avec le même dispositif de la déshydratation de la boehmite, par calcination, pour la fabrication d'alumines de transition. Ces deux phénomènes ont ainsi pu être observés conjointement pour la première fois dans un MET (figure 2).

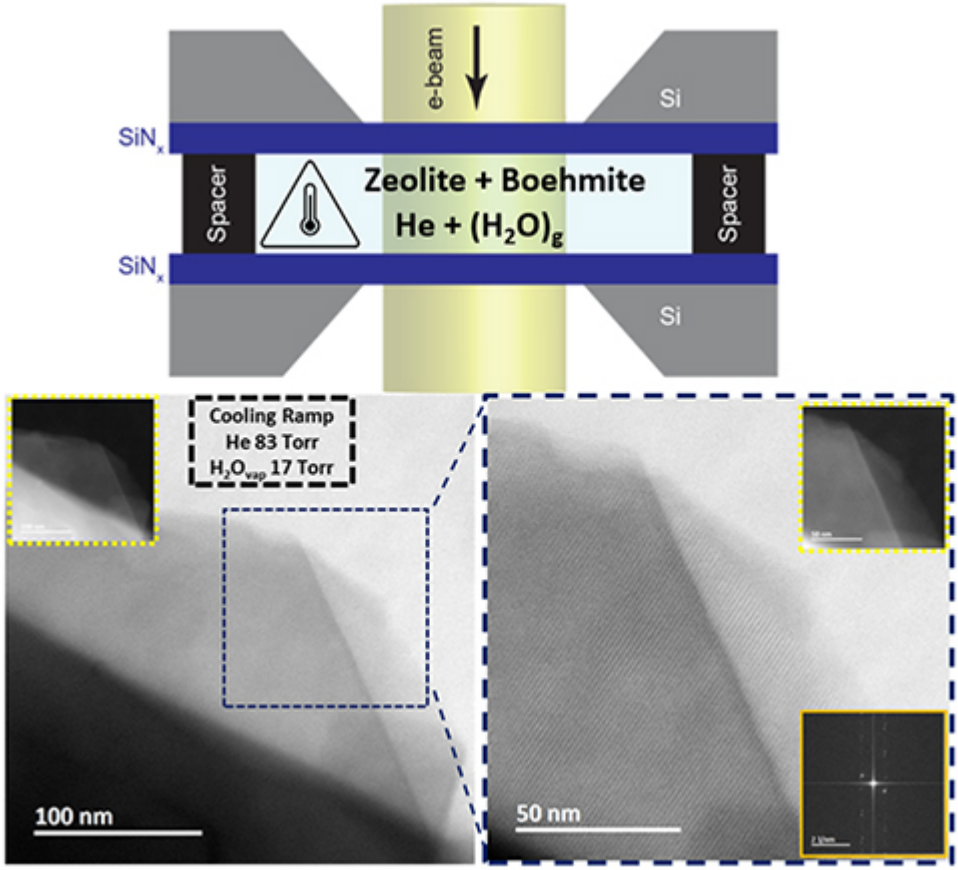


Figure 2 : Schéma de principe de la cellule environnementale utilisée en microscopie en transmission. Les images montrent, pour deux grandissements, les évidences morphologiques et structurales des effets de la désalumination de la zéolite par hydrolyse.

Pour étudier un mécanisme réactionnel

La spectroscopie vibrationnelle dans le domaine du moyen infrarouge (IRTF) a été utilisée pour étudier la photoréduction du CO_2 en présence de vapeur d'eau, sur un cocatalyseur composé de nanoparticules de platine supportées sur du dioxyde de titane (figure 3). La méthodologie operando[7] a permis de révéler l'impact des impuretés carbonées sur l'activité mesurée et donc la nécessité de contrôler l'état de surface initial du photocatalyseur. Des mesures IR operando en cycle jour/nuit ont également donné des pistes pour améliorer l'efficacité des photocatalyseurs, mais aussi apporté des informations sur les mécanismes réactionnels prenant place à la surface de ces matériaux [2]. Ainsi, des intermédiaires acétates ont été identifiés via des mesures isotopiques effectuées à la suite, et qui

ont révélé la présence de réactions de couplage Carbone-Carbone.

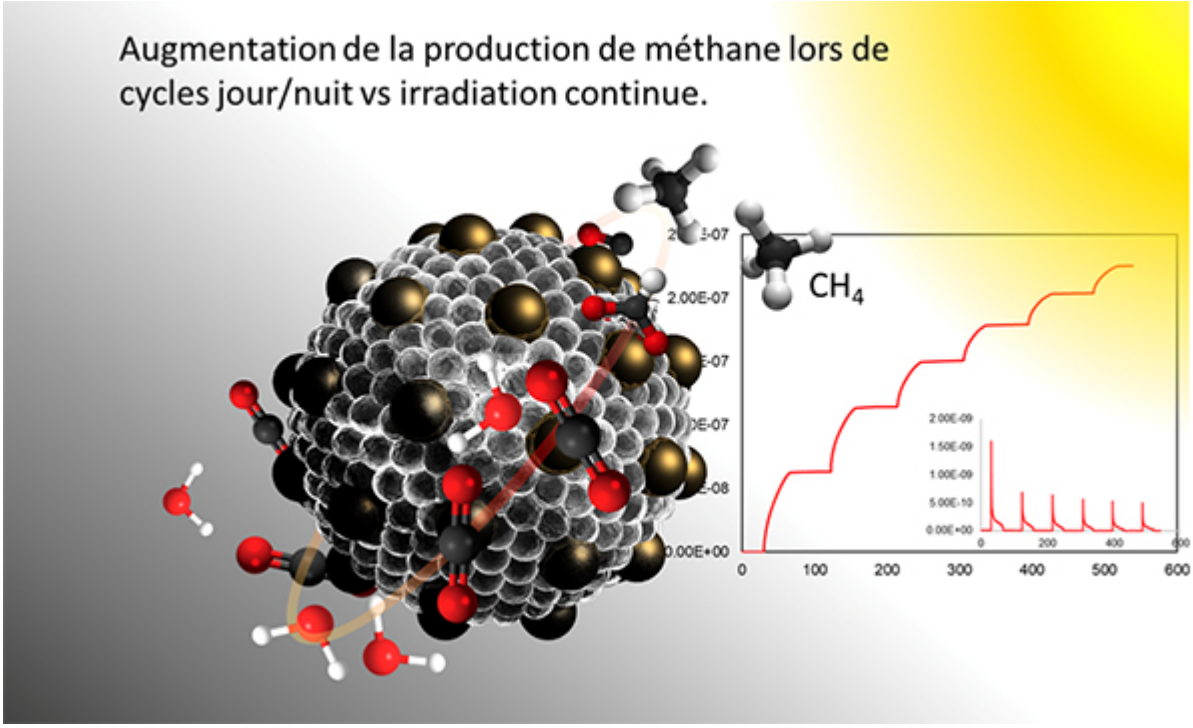


Figure 3 : Représentation du cocatalyseur de platine sur TiO2, des réactifs et des produits de photo réduction du CO2. Le graphique indique l'évolution de la quantité cumulée de CH4 produit et de sa dérivée (abscisse en minutes).

Dans ces différents travaux, il est apparu que les aspects de traitement de données massives et/ou bruitées sont essentiels. Le développement de méthodes chimiométriques et d'extraction de données pour ce qui concerne les spectroscopies d'absorption X et infrarouge, ainsi que les approches de débruitage, pour la microscopie électronique, constituent aujourd'hui des axes de développement indispensables à mener en parallèle à l'instrumentation.

[1]- En termes de propriétés : activité, sélectivité, stabilité.
[2]- Dans les conditions locales pertinentes, sans prélèvement.
[3]- Dans les conditions de réactions, avec suivi des évolutions et des produits.
[4]- Distinction entre les différentes formes de liaisons possibles (les espèces) d'un élément dans un environnement donné.
[5]- Travail réalisé avec l'Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg.
[6]- Microscopie électronique en transmission.
7- Développée avec le Laboratoire Catalyse et Spectrochimie de Caen (LCS).

Références :

1. B. Barata, C. Legens, E. Devers, O. Delpoux, L. Barthe, O. Roudenko, V. Briois, ***Chemical Speciation by Quick-XAS and Raman Spectroscopy: Validation of Two Cells for in situ Time-Resolved Monitoring of the Impregnation and Drying of CoMoP/Al2O3 Catalysts***,

ChemCatChem, Volume15, Issue7, 2023
>> https://doi.org/10.1002/cctc.202201440

2. J. Dankar, V. Rouchon, C. Pagis, M. Rivallan, M. El-Roz, ***Exploring the effect of the reaction conditions on the mechanism of the photocatalytic reduction of CO2 in the vapor phase over Pt/TiO2: an operando FTIR study***, Inorg. Chem. Front., 2023,10, 7155-7166
>> https://doi.org/10.1039/D3QI01758C

3. V. Girelli Consolaro, W. Baaziz, V. Rouchon, O. Ersen, ***Insight into the Mesopore Formation in Zeolites by Operando and 3D Electron Microscopy***, Microscopy and Microanalysis, Volume 27, Issue S2, 1 November 2021, Pages 87–88
>> https://doi.org/10.1017/S143192762101343X

Contacts scientifiques : christele.legens@ifpen.fr, mickael.rivallan@ifpen.fr et virgile.rouchon@ifpen.fr

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

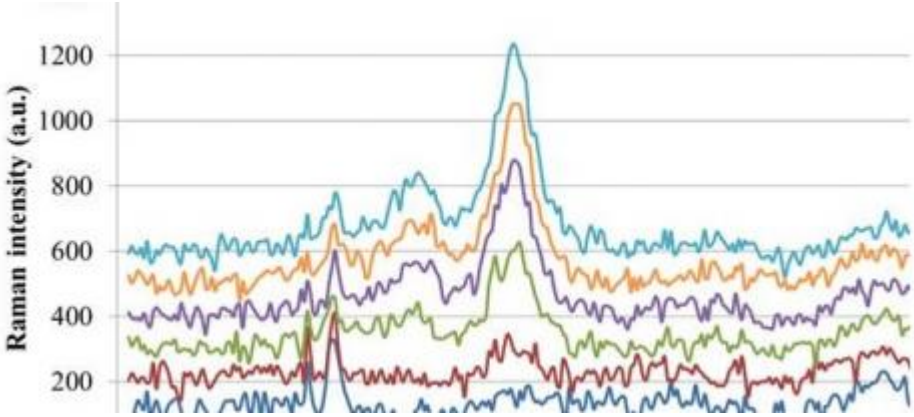


La photocatalyse, une voie lumineuse pour convertir le CO2 ?

Bien que le défi climatique rende urgent de limiter les émissions de CO2, certaines industries pourront difficilement s’en affranchir, comme les cimenteries ou les raffineries, qui sont à l’heure actuelle très

énergivores. C’est pourquoi un intérêt fort réside dans des procédés capables de récupérer le CO2 directement émis en sortie d’usine (...), puis de le valoriser à un moindre coût énergétique. C’est dans ce contexte qu’IFPEN s’est engagé dans le développement d’une technologie...

Sciences chimiques | **Cinétique de la catalyse et des réactions** | **Synthèse organique et minérale** | **Chimie physique** | **Science des surfaces, des interfaces et des matériaux**



La spectroscopie operando en toute transparence

THÈSE DE MARISA DE SOUSA DUARTE

Analyse et caractérisation | Analyse chimique | Sciences de l'ingénieur | Génie chimique et génie des procédés



Recherche fondamentale

Actualités décembre 2022

Laboratoire LCR CARMEN : une recherche en rupture pour la transition énergétique

Chimie physique | Science des surfaces, des interfaces et des matériaux

VS1 - Les catalyseurs hétérogènes « en direct live »

Les biocarburants sont une composante de la transition vers les énergies renouvelables, et une voie efficace de décarbonation des transports. Ils sont toutefois produits à partir de charges dont la composition peut affecter les matériaux des équipements employés pour leur transformation. C'est ainsi que, par exemple, le procédé d'hydrotraitement des huiles végétales et des graisses animales engendre une exposition à des concentrations élevées de composés oxygénés, naturellement présents dans la charge initiale ou provenant de leur transformation, et qui peuvent réagir avec les matériaux métalliques. La présence d'acides gras libres à des teneurs parfois importantes est un autre facteur de risque pour la corrosion.

Un travail de thèse a été consacré à l'étude de ce phénomène susceptible d'affecter la fiabilité des installations . Pour cela, une méthodologie d'évaluation de la corrosion a été développée dans des conditions représentatives du procédé : de pression (jusqu'à 80 bar en présence d'hydrogène) et de température (jusqu'à 350°C), tout en mettant en œuvre un renouvellement de la charge . Des analyses pratiquées sur les matériaux et sur la charge, à l'issue de ces essais d'exposition, ont permis de quantifier la corrosion et de proposer des mécanismes à l'œuvre.

On peut citer quelques résultats significatifs quant à l'ampleur du phénomène pour différents grades d'acier :

- à 220°C, des vitesses de corrosion généralisée supérieures à 1 mm/an ont été observées sur les aciers au carbone et faiblement alliés dans le cas de charges hautement acides (TAN > 16) ;
- dans une plage comprise entre 100 et 290°C, la cinétique de corrosion des aciers au carbone et faiblement alliés, suit une relation de type loi d'Arrhenius pour la vitesse de corrosion (Figure 1), et elle évolue linéairement avec le TAN (Figure 2) ;
- dans les distillats d'acides gras (TAN=200), les risques de corrosion imposent d'utiliser des nuances inoxydables alliées au molybdène, comme le 316L ou le 317L .

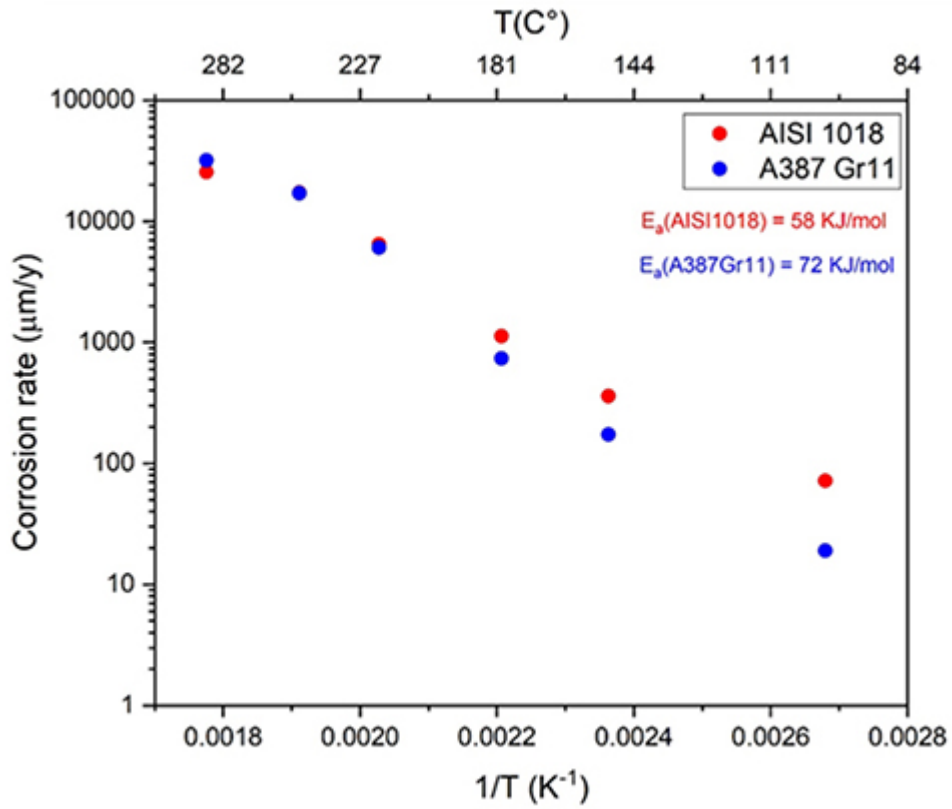


Figure 1 : Influence de la température sur la vitesse de corrosion de l'acier au carbone AISI 1018 et faiblement allié A387 Gr11 lors d'essais d'immersion dans du DTO (TAN=192).

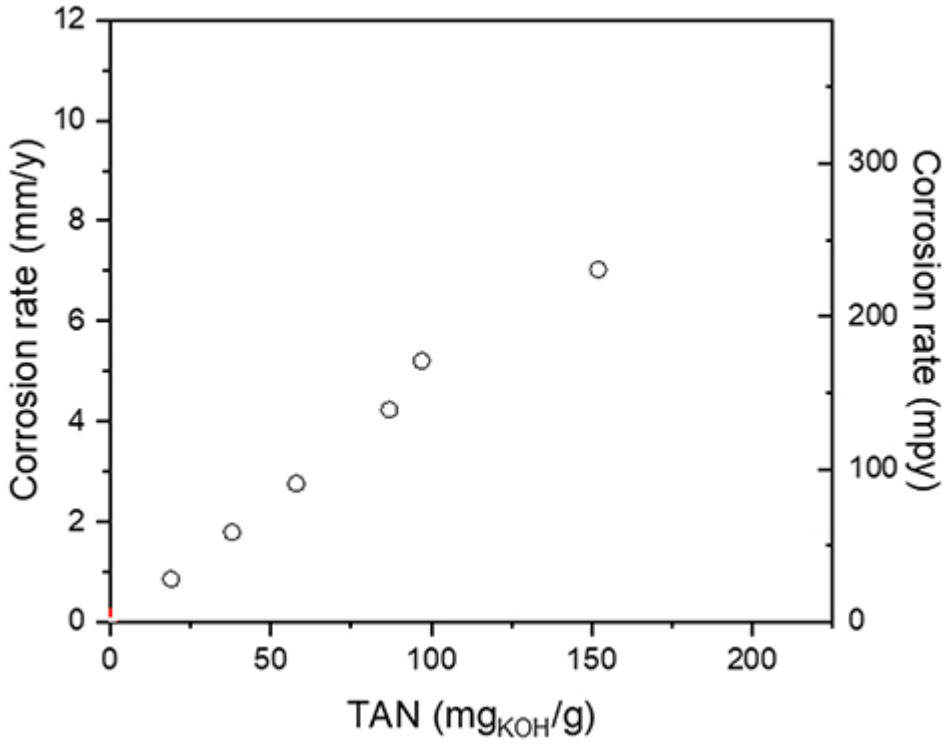


Figure 2 : Influence du TAN sur la vitesse de corrosion de l'acier au carbone AISI 1018 lors d'essais d'immersion à 220°C (mélange d'huile de colza et d'acide oléique).

Grâce à l'utilisation de plusieurs techniques d'analyse complémentaires (titrage potentiométrique, spectroscopie infrarouge, distillation simulée), le mécanisme de corrosion a pu être identifié. La consommation des acides gras libres avec un rapport de 2 mol de fonction acide pour 1 mol de fer dissous est mise en évidence par la diminution de la bande d'absorption caractéristique de la bande de vibration de la liaison C=O à 1711 cm^{-1}, caractéristique de l'acide oléique (Figure 3). Par ailleurs, un nouveau massif d'absorption IR est observé dans la région 1567 – 1605 cm^{-1}, caractéristiques des vibrations de la fonction carboxylate impliquée dans la formation de complexes organométalliques. Ces résultats prouvent que la corrosion de l'acier dans ces environnements est favorisée par la formation de complexes [1-2].

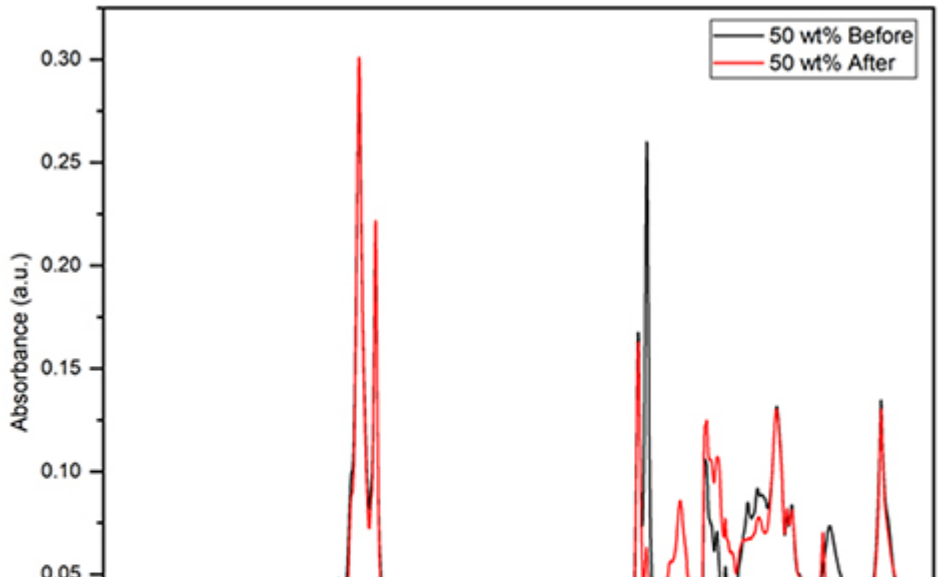


Figure 3 : Spectre infrarouge d’une huile végétale acide avant et après test de corrosion.

Les méthodes et connaissances développées au cours de ce travail de thèse sont désormais mises à profit pour les nombreux développements de procédés industriels de transformation de la biomasse, mais aussi pour des procédés en co-processing[5]. Pour le design de nouvelles unités industrielles, elles permettent de choisir les matériaux de construction d’une manière plus sûre et, pour les changements d’usages d’unités existantes, elles offrent des outils pour définir les limites d’usage des charges les plus corrosives.

[1]- [1] Thèse de F. Andari, Impact of biomass composition on corrosion: case of the hydrotreatment of vegetable oils and waste oils to produce biofuels, Thèse de doctorat, Université Lyon 1, 2022.
[2]- Renouvellement partiel de la charge en mode semi-batch, sans ouverture du réacteur d’essai ni baisse de la température.
[3]- Le TAN (Total Acid Number) est la mesure d'acidité totale d'une huile, exprimée en milligrammes d'hydroxyde de potassium nécessaires pour neutraliser un gramme d’huile (mg KOH/g huile).
[4]- Distilled Tall Oil.
[5]- Traitement d’une charge composée d’un mélange d’hydrocarbures conventionnels et d’une ressource alternative (huile bio-sourcée, déchets plastiques pyrolysés, etc.).

Références :

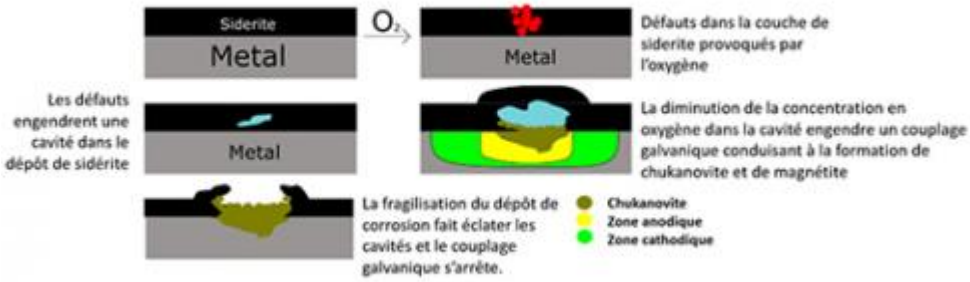
1. Andari, J. Kittel, J. Fernandes, N. Godin, B. Ter-Ovanessian, F. Ropital, ***High temperature corrosion in various grades of vegetable and waste oils used for bio-fuel production***, Corrosion Science, 2022, Vol 206, Article 110501
   >> https://doi.org/10.1016/j.corsci.2022.110501

2. F. Andari, J. Kittel, J. Fernandes, L. Dodelin, F. Ropital, ***Corrosion issues in the conversion of vegetable and waste oils to produce biofuels***, NACE/AMPP 2023 Conference paper 19308
   >> https://onepetro.org/amppcorr/proceedings-abstract/AMPP23/All-AMPP23/AMPP-2023-19308/527014

Contacts scientifiques : Jean Kittel, joanna.fernandes@ifpen.fr et François Ropital

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Autoréparation contre la corrosion localisée

Du fait de son faible coût et de ses bonnes propriétés mécaniques, l'acier au carbone est un matériau très utilisé, y compris pour de nombreux équipements en contact avec certains environnements agressifs, comme par exemple les milieux aqueux contenant du CO2...

Électrochimie et corrosion

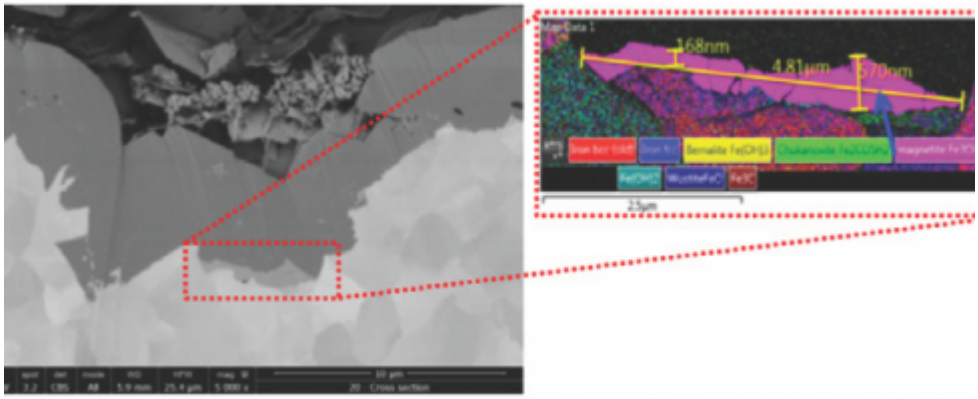


IFPEN

Actualités mai 2021

La corrosion, un des grands enjeux de la transition énergétique, mobilise les efforts de recherche d’IFPEN

Énergies renouvelables | Hydrocarbures responsables



L’acier au carbone en mode autodéfense contre la corrosion

La corrosion des aciers au carbone ou très faiblement alliés, par les milieux aqueux contenant du CO_2 , pénalise le développement de nomb

Chimie physique | Science des surfaces, des interfaces et des matériaux | Électrochimie et corrosion

VS2 - Production de biocarburants : comprendre et maîtriser la corrosion par les huiles employées

L’injectivité dans les formations géologiques est un enjeu connu de longue date dans la production pétrolière (récupération assistée) mais qui perdure dans des domaines d’activités liés aux énergies nouvelles et au climat (géothermie, stockage souterrain de CO_2, etc.). Les pertes d’injectivité, qui résultent du colmatage des formations géologiques, sont un problème récurrent lié au fait que les eaux réinjectées sont fréquemment chargées en éléments organiques et minéraux en suspension, sous forme de particules colloïdales.

Pour tenter de remédier à ce colmatage ou tout au moins le minimiser, il est important de bien comprendre les mécanismes à l’œuvre.

Le phénomène de transport et de dépôt de particules en milieu poreux a été largement étudié par le passé, notamment à l’aide de mesures de perméabilité sur des carottes de roche (corefloods). Son effet quantitatif sur cette propriété est donc bien documenté mais, en raison de l'opacité des roches, on manque de connaissances sur les mécanismes qui se produisent à l'échelle des pores.

Ces dernières années, les progrès des outils d'imagerie et de visualisation ont permis d'étudier les phénomènes à cette échelle. Avec ces outils, des résultats clés sur la dynamique du colmatage ont été obtenus par couplage à la microfluidique, cette méthodologie permettant de contrôler précisément et de manipuler de très petits volumes de fluides[1] dans des microstructures confinées. De plus, les développements récents des techniques de gravure offrent la possibilité de reproduire la complexité des milieux poreux réels. Le couplage de toutes ces techniques permet ainsi de visualiser directement l’écoulement pour décrire de manière pertinente les phénomènes impliqués à l’échelle locale.

Lors d’un travail de thèse réalisé à IFPEN[2] en collaboration avec l’ICMCB[3], la problématique de dépôt et de colmatage a été étudiée via une approche microfluidique combinant deux techniques de visualisation : l'imagerie optique [1] et l'imagerie par fluorescence induite par laser [2]. Les micromodèles employés (Fig. 1(a)) présentent des géométries inspirées d’images de réseaux poreux dans de la roche réelle. Une suspension modèle de particules micrométriques avec des charges répulsives[4] a été utilisée. Le couplage entre observations multi-échelles (Fig. 1(b), (d)) et mesures macroscopiques (pression et concentration) (fig. 1(c)) a permis une caractérisation fine des mécanismes agissant à l’échelle du pore et de mieux comprendre les phénomènes en jeu, dépendant à la fois de l’hydrodynamique (vitesse, géométrie des pores) et des interactions particule-particule et particule-matrice solide (forces DLVO[5]).

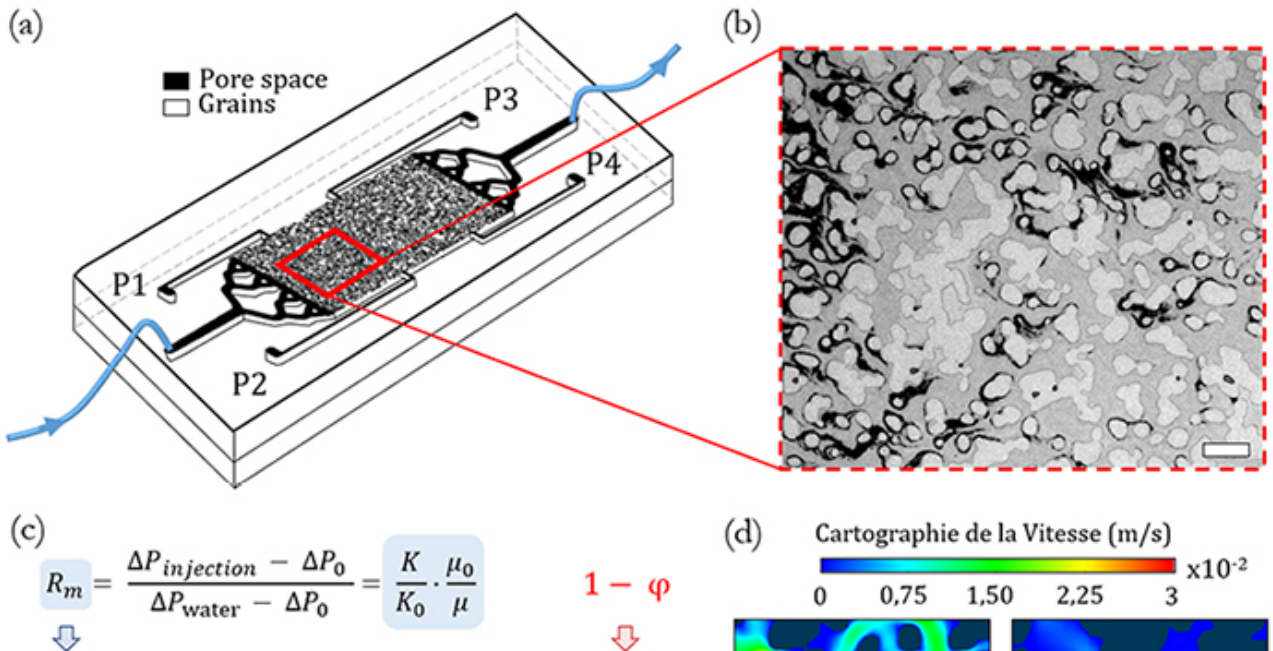


Figure 1 (a) Représentation schématique du micromodèle utilisé. P1/P2/P3 et P4 correspondent à des prises de mesures de pression.
(b) Exemple d'observation par imagerie classique du transport de particules dans le milieu poreux. Les dépôts, l'espace poreux et les grains apparaissent en noir, gris foncé et gris clair, respectivement.
(c) Evolution caractéristique du coefficient de réduction de mobilité Rm au cours de l'injection d'une suspension particulaire et de la réduction de porosité associée, obtenue par traitement d'image.
(d) Observations locales des sites et nature des dépôts selon la localisation dans le milieu poreux et la vitesse locale d'écoulement obtenue par simulation numérique. G et PS correspondent à un grain et à l'espace poreux, respectivement. Le dépôt apparait en noir.

En recoupant les caractéristiques de dépôts obtenues expérimentalement avec les champs de vitesse établis par simulation numérique, cette étude réalisée dans les conditions de réinjection de fluides géothermiques (petites particules, fort débit, milieux poreux perméables) a permis d'identifier les différents sites et régimes de dépôt ainsi que de décrire les mécanismes de colmatage. Un des résultats majeurs obtenus est la mise en évidence d'un phénomène d'agrégation induit par cisaillement [3]. Les sites de dépôt, qui constituent des pièges principalement dictés par les lignes de courant dans le milieu poreux, engendrent la surconcentration locale en particules selon cinq configurations : dans le sillage de grains solides, aux points de stagnation, dans les régions sans écoulement, à la confluence de deux flux locaux ou à l'entrée d'un seuil de pore étroit. Cette surconcentration locale en particules, lorsque couplée à un fort cisaillement local[6], induit alors la formation d'agrégats.

Le phénomène d'agrégation hydrodynamique est fortement favorisé par les débits d'injection élevés et présente un risque majeur qu'il faut bien anticiper et contrôler. En effet, ces agrégats irréversibles peuvent se former même lorsque les fluides sont finement filtrés et peu concentrés en particules. Ils sont facilement entraînés par l'écoulement, sans être cassés, jusqu'à colmater des seuils de pores par simple exclusion géométrique, les agrégats étant trop grands pour circuler.

La cinétique de cet endommagement a été étudiée en fonction de la concentration et de la taille des particules ainsi que du débit d'injection. Des interprétations basées sur les observations locales et sur les mécanismes mis en évidence ont ensuite été proposées. Enfin, l'ensemble des résultats obtenus grâce à la microfluidique a été validé sur des systèmes plus réels (par exemple une suspension de particules de polystyrène dans des massifs reconstitués de sable ou des particules d'argiles dans les micromodèles) et ont débouché sur des pistes de remédiation du phénomène.

[1]- De l'ordre du micro voire du picolitre.
[2]- **Anne-Sophie Esneu**, ***Etude des mécanismes d'endommagement des formations lors de la réinjection des fluides géothermiques***, Université de Bordeaux, 2024.
[3]- Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux - UMR 5026 du CNRS.
[4]- Pour éviter l'agrégation préalablement à l'injection.
[5]- Derjaguin, Landau, Verwey, Overbeek.
[6]- Cisaillement consécutif à l'écoulement du fluide en présence d'un aménagement aléatoire des grains.

Références :

1. A.-S. Esneu, C. Marlière, L. Nabzar, A. Erriguible, S. Glockner, S. Marre and J. Boujlel. ***Transport and clogging of colloidal particles: effects of concentration and geometry of the porous medium***. In Proceedings of World Geothermal Congress 2023, Beijing, China, October 2023.

2. A.-S. Esneu, V. Ricordeau, A. Perez, G. Pilla, M. Bardi and J. Boujlel. ***The use of Laser-Induce Fluorescence Imaging to investigate transport phenomena of complex fluids in a 2D porous medium***. To be submitted in Transport in Porous Media

3. A.-S. Esneu, A. Erriguible, S. Glockner, S. Marre and J. Boujlel. ***2D heterogeneous porous medium permeability reduction by shear-induced aggregation***. To be submitted in Physics Review Letters.

Contacts scientifiques : anne-sophie.esneu@ifpen.fr et jalila.boujlel@ifpen.fr

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités mars 2024

Microfluidique et chémoinformatique : des voies complémentaires d'accès à la conductivité thermique !

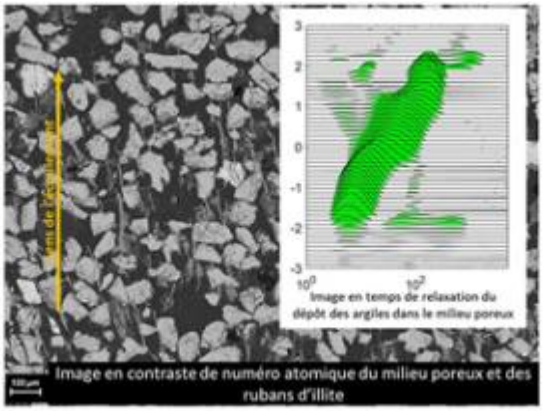


Recherche fondamentale

Actualités septembre 2023

Le colmatage en géothermie : quels mécanismes pour quels leviers d’action ?

Pétrophysique et transferts en milieux poreux | Analyse structurale et imagerie



Le phénomène de colmatage est un enjeu fort pour la géothermie

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...

Pétrophysique et transferts en milieux poreux

Analyse structurale et imagerie

Physique du transfert et du transport

VS3 - La Microfluidique au service d’une injectivité préservée

Les données de spectroscopie proche infrarouge (SPIR[1]) font l'objet de traitements mathématiques, via des approches chimiométriques[2] en utilisant généralement un modèle de type Partial Least Squares (PLS). Cette méthodologie linéaire cherche à établir une relation statistique, représentée par la covariance maximale, entre une variable explicative X et la variable expliquée y. Elle a fait ses preuves à IFPEN pour prédire les propriétés de produits pétroliers et, depuis quelques années, elle a suivi le virage des nouvelles technologies de l'énergie (NTE) en s'appliquant à des domaines comme les bio-carburants ou le recyclage chimique des plastiques.

L'approche en elle-même repose notamment sur des opérations de pré-traitement du signal destinées à corriger les artefacts analytiques qui impactent la pertinence des modèles issus de l'exploitation des données expérimentales. Cependant, dans un domaine en perpétuelle évolution qui impose la mise à jour plus régulière des modèles, cette solution n'est plus considérée comme satisfaisante.

L'apprentissage profond, alternative prometteuse pour le développement de modèles issus de l'expérience, est actuellement abordé dans le cadre d'un travail de thèse[3]. Dans cette approche, un réseau de neurones extrait l'information à partir des données sans qu'il soit nécessaire de préciser explicitement comment le faire. Un calcul d'erreur[4] entre la prédiction du modèle et la valeur attendue pour la variable expliquée permet l'optimisation des paramètres internes du réseau de neurones. Il s'agit là d'un changement de paradigme complet par rapport à la chimiométrie pour laquelle il est nécessaire de développer un plan d'expérience et de tester différentes combinaisons de traitement de signal.

Un travail mené à IFPEN s'est intéressé aux réseaux convolutionnels profonds et en particulier à développer le sien propre, « Inception for Petroleum Analysis » (IPA), en vue de mieux répondre aux besoins quotidiens en matière d'analyse SPIR [1]. Il est inspiré de l'état de l'art en apprentissage profond pour la vision assistée par ordinateur et basé sur plusieurs blocs de calcul, dont l'architecture est présentée sur la Figure 1.

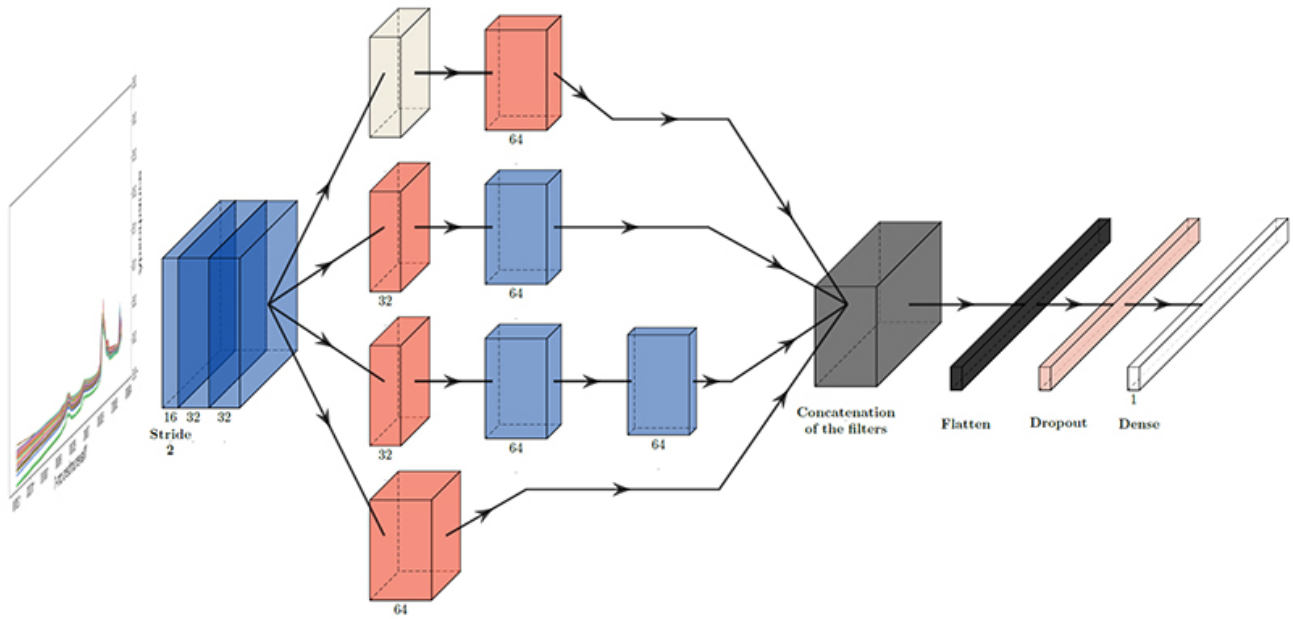


Figure 1 : L'architecture IPA (Inception for Petroleum Analysis)

Par comparaison avec un modèle chimiométrique traditionnel (PLS) et avec le modèle d'apprentissage profond DeepSpectra [2], pris comme référence, le modèle IPA a été testé sur sa capacité à prédire le nombre de cétane[5] des distillats moyens produits à partir de divers procédés industriels. Tous trois ont d'abord été entraînés sur un jeu de 174 spectres SPIR, enregistrés dans la gamme spectrale 4000-12000 cm^{-1} puis testés pour validation sur une autre base de 75 spectres. Dans ces bases, le nombre de cétane variait de 19.0 à 71.1, avec pour moyenne 43.3 et un écart type de 11.1. La gamme spectrale a été réduite dans un premier temps pour supprimer les bandes PIR entre 4000-4500 cm^{-1}, saturées et affectées par des problèmes de non-linéarité. Le modèle PLS a nécessité une étape de pré-traitement du signal avant calibration comprenant une correction de la ligne de base, contrairement à la calibration du modèle IPA qui se fait directement sur des données sans pré-traitement.

La qualité des modèles est généralement évaluée à l'aide de plusieurs distances, notamment la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne, calculée entre les prédictions du modèle et les valeurs mesurées. Sur la gamme spectrale réduite, entre 4500-12000 cm^{-1}, le modèle IPA présente une erreur inférieure de 40 % par rapport au modèle PLS, et est 20 % plus précis que le modèle d'apprentissage profond DeepSpectra. De plus, dans deux zones de nombre de cétane peu renseignées en termes de calibration[6], une différence importante de prédiction entre les différents modèles a été observée (Figure 2) : il s'agit des parties extrêmes du diagramme de parité de la base de validation, où IPA propose des prédictions pertinentes alors que le modèle PLS manque de précision (tout comme pour DeepSpectra, non montré ici). Enfin, sur le même ensemble de données, en prenant la gamme spectrale complète 4000-12000 cm^{-1}, IPA est 50 % plus précis que la PLS et 21 % plus précis que DeepSpectra.

Les performances supérieures du modèle IPA montrent qu'il est en mesure de capturer davantage d'informations pertinentes que les modèles PLS et DeepSpectra, plus particulièrement dans la gamme spectrale complète et ce, sans être perturbé par la partie saturée. De même, dans les plages de valeurs extrêmes prises en compte, IPA est resté performant pour généraliser l'information à une large gamme de valeur de la propriété prédite, à la différence des modèles PLS et DeepSpectra.

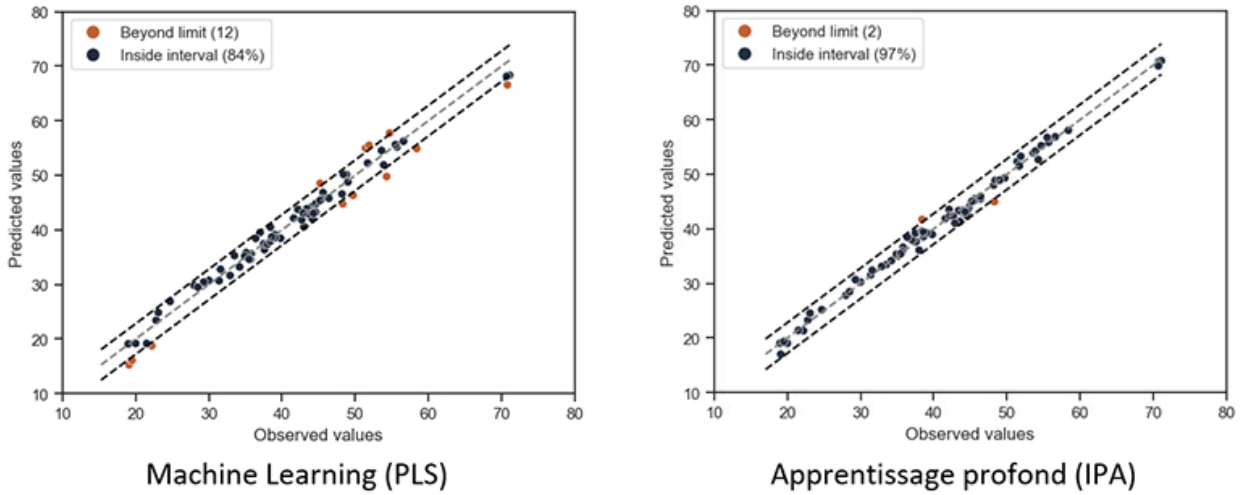


Figure 2 : Diagramme de parité – Distillats moyens (gamme spectrale réduite entre 4500-1200 cm-1)

[1]- En anglais : Near Infrared Spectroscopy (NIRS).
[2]- La chimiométrie est l'application d'outils mathématiques, en particulier statistiques, pour obtenir le maximum d'informations à partir de données issues des analyses physico-chimiques.
[3]- Thèse de **F. Haffner**, ***Apprentissage profond et proche infrarouge pour intensifier l'usage des méthodes spectroscopiques***.
[4]- Reposant sur une fonction de perte.
[5]- Nombre permettant d'évaluer précisément l'aptitude d'un gazole à s'auto-enflammer.
[6]- Nombres de cétane de 18 à 20 et de 70 à 72.

Références :

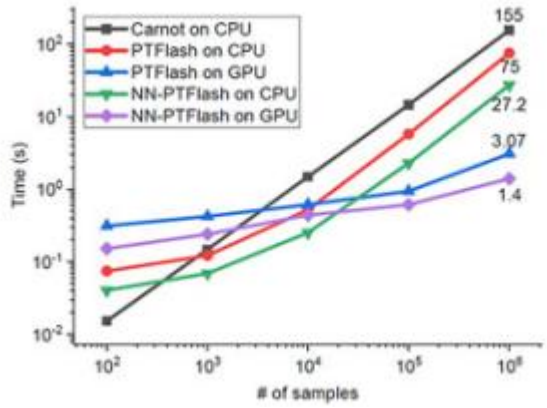
1. F. HAFFNER, M. LACOUE-NEGRE, A. PIRAYRE, D. GONÇALVES, J. GORNAY and M. MOREAUD, IPA: ***A deep CNN based on Inception for Petroleum Analysis***, Fuel, Publication soumise.

2. X. ZHANG et al., ***DeepSpectra: An end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis***, Analytica chimica acta, 2019
   >> DOI: 10.1016/j.aca.2019.01.002

Contacts scientifiques : Maxime Moreaud (deep learning) et marion.lacoue-negre@ifpen.fr (proche infrarouge, chimiométrie)

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

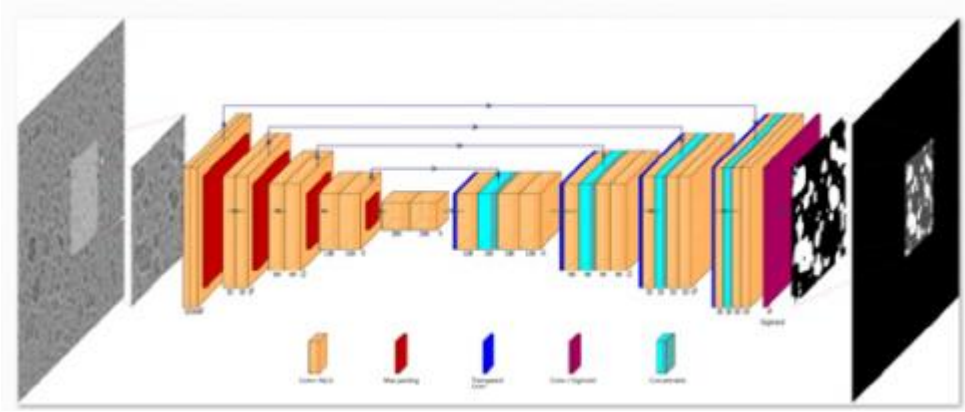
VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



La thermodynamique fait son apprentissage… profond

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...

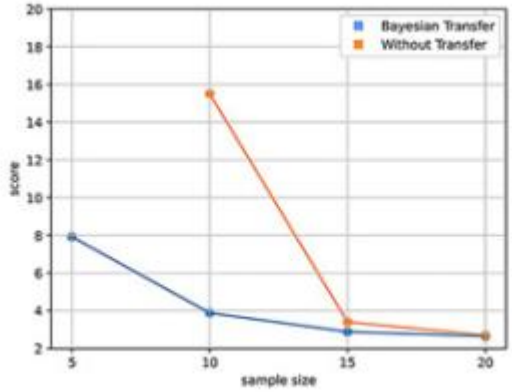
Thermodynamique / Modélisation moléculaire | **Traitement du signal / Science des données**



Segmentation sémantique par apprentissage profond en sciences des matériaux

La segmentation sémantique réalisée sur des images de microscopie est une opération de traitement effectuée en vue de quantifier la porosité d'un matériau et son hétérogénéité. Elle vise à affecter une classe d'appartenance (niveau d'hétérogénéité de la porosité) à chaque pixel de l'image. Cependant elle est très difficile sur certains matériaux (comme les alumines employées pour la catalyse), voire impossible par une approche classique de traitement d'image, car les différences de porosité sont caractérisées par des contrastes faibles et des variations de texture complexes. Un moyen de dépasser cette limitation est d'aborder par apprentissage profond la segmentation sémantique, en recourant à un réseau de neurones convolutifs.

Sciences chimiques | **Synthèse organique et minérale** | **Analyse et caractérisation** | **Analyse structurale et imagerie** | **Mathématiques et informatique** | **Traitement du signal / Science des données**



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

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, 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...

Génie chimique et génie des procédés | **Traitement du signal / Science des données**

VS4 - L’apprentissage profond pour la caractérisation des fluides

Les procédés utilisant la catalyse hétérogène[1] nécessitent la conception et le développement de matériaux innovants, aux propriétés mécaniques et texturales contrôlées, pour réaliser des supports de catalyseurs efficaces. En effet, la microstructure poreuse de ces supports est déterminante dans la performance du catalyseur supporté, puisqu'elle affecte fortement la résistance mécanique du support et les phénomènes de transferts impliqués. La fabrication industrielle de supports aluminiques appelés « extrudés » est mise en œuvre suivant un procédé de malaxage-extrusion, qui vise à passer d'un précurseur d'alumine sous forme de poudre (la boehmite) à des solides micrométriques.

Ce procédé de mise en forme permet d'optimiser les propriétés d'intérêt du support en jouant sur les conditions de chacune des deux opérations unitaires.

Une étude expérimentale menée dans le cadre d'une thèse en cours[2] a porté exclusivement sur l'opération de malaxage, en vue de caractériser ses effets sur les propriétés de pâtes de boehmite [1, 2]. Pour cela, plusieurs pâtes ont été préparées dans un malaxeur pilote (illustré Figure 1), en mélangeant de la poudre de boehmite et des solutions aqueuses acides et basiques. Les propriétés texturales et mécaniques des pâtes ainsi obtenues ont été étudiées en fonction de la durée de malaxage (de 3 min à 4 h), de la vitesse de rotation des bras (de 10 à 100 tr/min) et de la composition de la pâte (pH résultant de 5 à 9, modulé par ajout de solutions basiques à différentes concentrations). La distribution des tailles des pores, la surface spécifique et le volume poreux ont été analysés par physisorption d'azote et par porosimétrie au mercure sur des échantillons séchés, tandis que les propriétés mécaniques ont été caractérisées in-situ dans le malaxeur par une simple mesure du couple de malaxage.

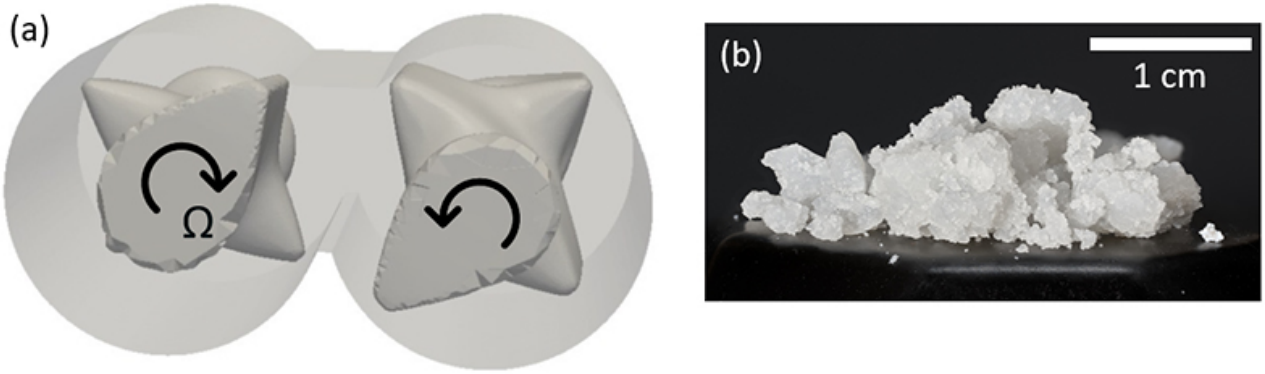


Figure 1 : (a) Schéma de la cuve de malaxage (volume de 80 cm3).
(b) Photo d'une pâte de boehmite à pH = 6,2, prise hors du malaxeur.

Les résultats obtenus montrent que la composition de la pâte contrôle fortement les propriétés des échantillons. C'est ainsi que l'on observe une augmentation du couple mesuré dans le malaxeur, ainsi que de la porosité de la pâte séchée (Figure 2) pour les compositions au pH plus élevé. De plus, l'évolution temporelle du couple mais aussi celle des propriétés texturales des supports est régie par la déformation cumulée, grandeur calculée comme le produit de la vitesse de rotation et du temps de malaxage et homogène à un nombre de tours subis par la pâte. Enfin, il s'avère qu'un paramètre pertinent pour rationaliser l'évolution de ces propriétés texturales - telles que mesurées pour une large gamme de pH, de durée de malaxage et de vitesse de rotation - est le produit de cette déformation cumulée par le pH de la pâte.

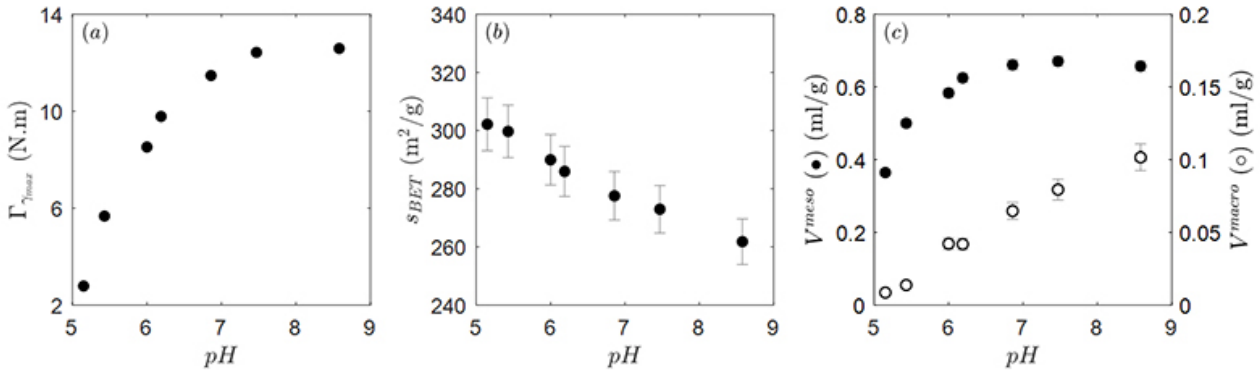


Figure 2 : Influence du pH de la pâte sur (a) le couple mesuré in-situ après 2h40 de malaxage à 50 rpm, (b) la surface spécifique (physisorption d'azote sur pâtes séchées) et (c) les volumes poreux (intrusion de mercure sur pâtes séchées).

Cette étude, dédiée à la caractérisation des effets du malaxage sur les propriétés texturales et mécaniques des pâtes de boehmite, a permis d'identifier distinctement l'influence acido-basique de leur composition et la contribution mécanique du malaxeur. L'identification d'un paramètre de contrôle unique (produit de la déformation et du pH de la pâte) permettra, à l'échelle du laboratoire, de savoir exactement quelles conditions opératoires de malaxage appliquer pour fabriquer une pâte de porosité choisie. Ce résultat s'avère donc intéressant pour le développement de nouveaux catalyseurs hétérogènes innovants. Enfin, la suite de ce travail consistera à caractériser ex-situ les propriétés mécaniques des pâtes avec des techniques telles que la rhéométrie, l'indentation et la compression, afin de caractériser plus rigoureusement l'effet du malaxage sur les propriétés mécaniques de pâtes de boehmite.

[1]- Tels que les procédés d'hydrotraitements ou de reformage catalytique.
[2]- Thèse de Mathilde Auxois, Identification et étude de descripteurs du malaxage d'une pâte de boehmite pour la conception de nouveaux solides.

Références :

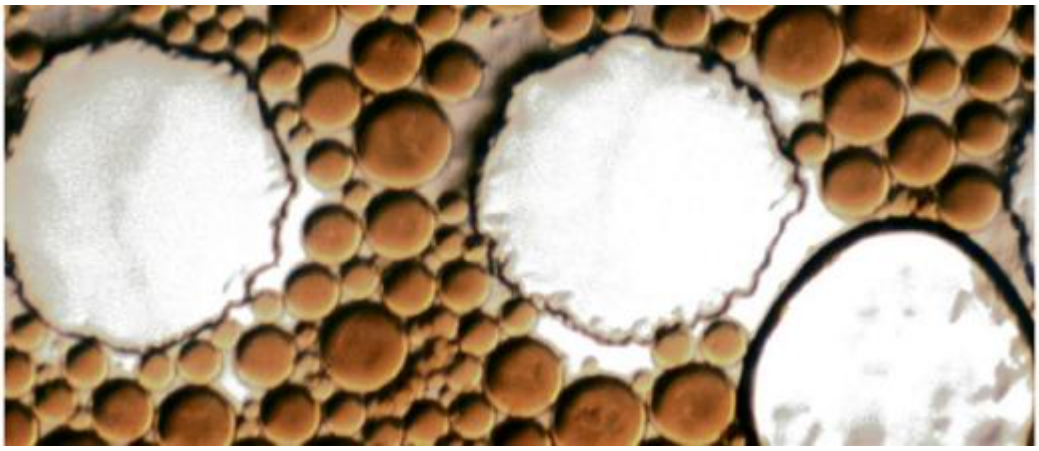
1. Mathilde Auxois, Marine Minière, Chloé Bertrand-Drira, Fabien Salvatori, Jan Verstraete, Sébastien Manneville, Thibaut Divoux, ***Tuning properties of catalysts supports via kneading conditions of colloidal pastes***, European Colloid and Interface Society congres, 2023

2. Mathilde Auxois, Marine Minière, Chloé Bertrand-Drira, Fabien Salvatori, Jan Verstraete, Sébastien Manneville, Thibaut Divoux, ***Textural properties of dense granular pastes produced by kneading***, arXiv:2402.09220

Contacts scientifiques : mathilde.auxois@ifpen.fr et marine.miniere@ifpen.fr

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

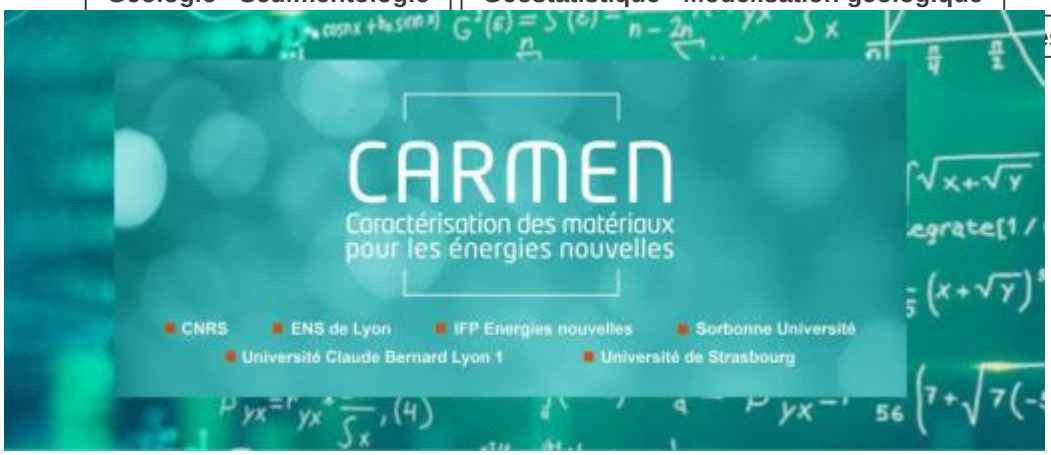


Recherche fondamentale

Actualités octobre 2023

Les milieux poreux interpellent les scientifiques

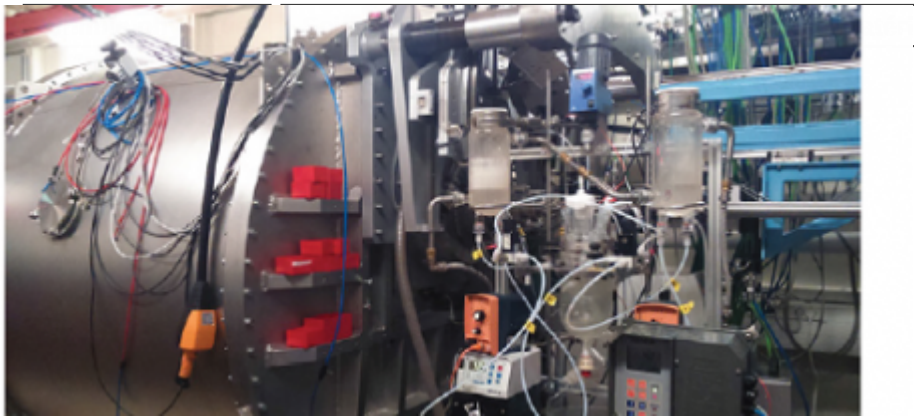
Géologie - Sédimentologie | Géostatistique - Modélisation géologique | ...s procédés



Recherche fondamentale

Actualités décembre 2022

Laboratoire LCR CARMEN : une recherche en rupture pour la transition énergétique



aux

Boehmite rhapsody ! Une précipitation tout en maîtrise

Les alumines de transition[a], largement utilisées comme supports de catalyseur, jouent un rôle clé pour de nombreux procédés de raffinage.

Hydrocarbures responsables | Carburants

Sciences chimiques | Synthèse organique et minérale | Analyse et caractérisation | Analyse structurale et imagerie



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

VS5 - Fabrication des supports catalytiques : un nouveau paramètre pour contrôler le malaxage des pâtes de boehmite

Les lignes d'ancrage sont des éléments essentiels pour la stabilité des structures flottantes en mer, comme celles supportant des éoliennes. Elles sont le plus souvent constituées de câbles en acier reliés par une chaîne à la plateforme (aussi appelée « flotteur »). De nouvelles solutions sont étudiées, dans lesquelles le câble est directement connecté au flotteur, permettant ainsi d'éliminer la chaîne qui s'avère être un point faible mécanique, et de simplifier cette liaison. Mais, dans de telles configurations, le câble subit un chargement combiné de tension et de flexion cycliques, pour lequel il n'a pas été conçu. En effet, ces câbles d'ancrage, mono-toron[1], sont optimisés pour une utilisation en tension uniquement.

Plutôt que de réaliser des essais de fatigue représentatifs[2], coûteux et difficiles à interpréter, IFPEN a adopté une approche recourant à de la simulation numérique multi-échelle. Au travers de celle-ci, une modélisation fine du câble permet de calculer les chargements locaux des fils métalliques à partir des chargements globaux - tension et flexion- à l'échelle du flotteur [1, 2]. Ces chargements calculés peuvent être alors reproduits en laboratoire sur un banc d'essai apte à tester de nombreuses configurations[3].

Il s'avère que la tension et la flexion cycliques du câble génèrent du fretting fatigue[4] au niveau des fils, phénomène absent dans le cas de la tension cyclique seule, pour laquelle l'endommagement par frottement est négligeable. Sous ce mode de chargement combiné, la sollicitation locale la plus critique est le glissement partiel, caractérisé par le fait que le centre du contact reste collé tandis que sa périphérie glisse (Figure 1).

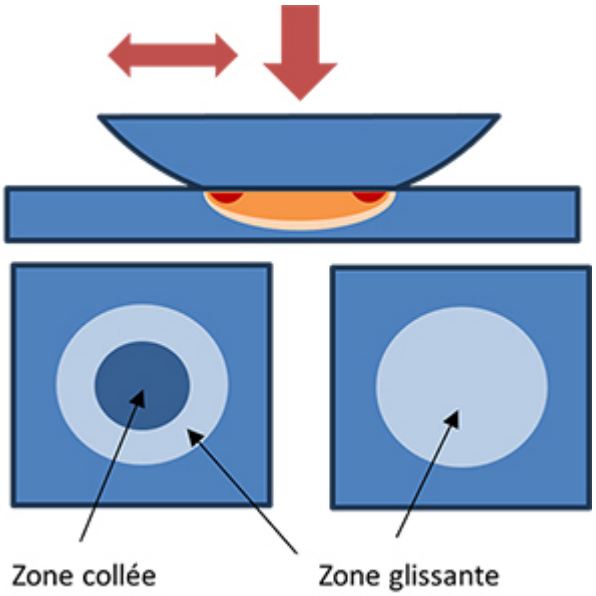


Figure 1 : Schéma d'une sollicitation en fretting avec les deux régimes de glissement possibles : glissement partiel à gauche et glissement total à droite.

Cependant, dans un câble d'ancrage en mer, les fils ne sont pas nus car ils sont protégés de la corrosion par un revêtement de zinc[5] et par de la graisse, à quoi s'ajoute une gaine polymère étanche autour du câble. Les essais de fretting fatigue ont permis de mieux comprendre l'effet mécanique de ces protections. Ils ont été réalisés, soit avec une seule des protections (zinc ou graisse), soit avec les deux.

Prises individuellement, la galvanisation et la graisse n'ont pas d'effet notable [3]. La couche de zinc est rapidement éliminée du contact par usure et la graisse, épaisse pour ne pas couler le long du câble, mais rapidement chassée du contact, voit son pouvoir lubrifiant limité au cas d'un glissement total.

Pourtant, prises ensemble, les deux protections améliorent nettement le comportement en fretting fatigue des fils [4]. L'élimination du zinc au niveau du contact (Figure 2) produit en effet une cuvette qui limite l'évacuation de la graisse et améliore son pouvoir lubrifiant, même en glissement partiel.

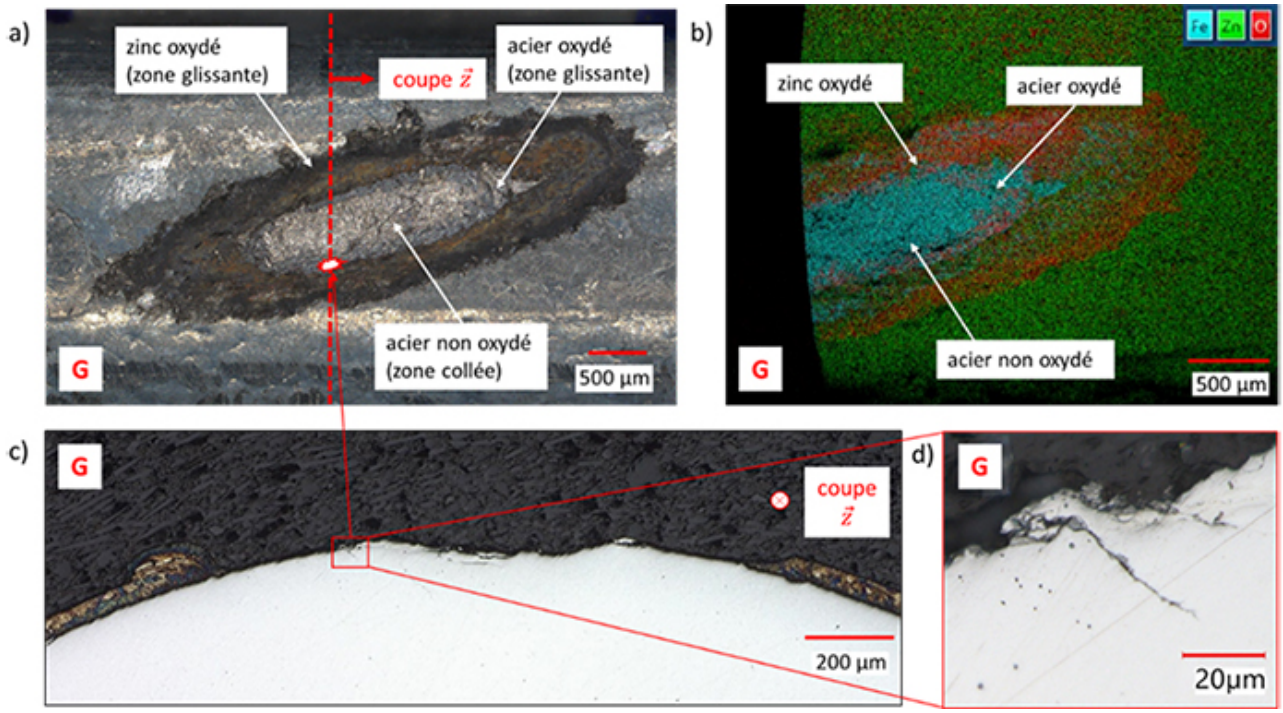


Figure 2 : Essai de fretting simple interrompu sur fils zingués, a) vue optique de la trace, b) vue EDX de la trace (affichage de l'oxygène, du zinc et du fer), c, d) vues optique de la coupe axiale.

Cette synergie imprévue est bénéfique à la tenue en service des matériaux métalliques soumis à du fretting fatigue, ainsi que le démontrent nos résultats expérimentaux (Figure 3).

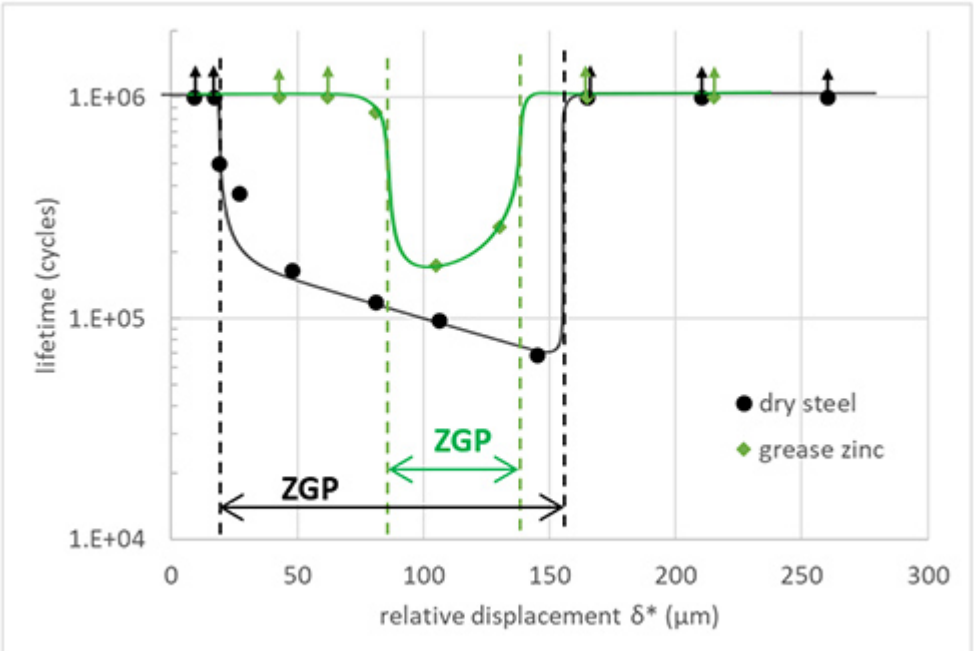


Figure 3 : Courbes de fretting fatigue pour le contact sec entre fils acier (noir) et le contact graissé entre fils galvanisés (vert). Chargement en fatigue et force de contact constantes. Glissement relatif entre les fils en abscisse et durée de vie en ordonnée. La combinaison du zinc et de la graisse améliore notablement la durée de vie. ZGP : zone critique d'endommagement en glissement partiel

Le couplage de la simulation numérique avec des essais mécaniques représentatifs du chargement local des fils a permis de reproduire, pour mieux les comprendre, des mécanismes en jeu à une échelle fine. Cette compréhension de l'endommagement en fretting fatigue et de la synergie favorable entre des éléments de protection non destinés à ce problème ouvre de nouvelles perspectives pour améliorer la conception et l'utilisation des câbles d'ancrage en acier pour les supports flottants en milieu marin.

[1]- Un toron est un assemblage de brins métalliques (ou textiles) enroulés en hélice autour d'un axe longitudinal. Un câble peut être constitué de un ou plusieurs torons.
[2]- Reproduisant la configuration réelle à pleine échelle.
[3]- Montage situé au Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes (Ecole Centrale de Lyon).
[4]- Phénomène d'initiation et de propagation des fissures dû à une combinaison de fatigue et de frottement.
[5]- Protection galvanique.

Thèse de **Sébastien Montalvo :** ***Étude de l'endommagement par fretting-fatigue de fils de câbles d'ancrage offshore : influence de la galvanisation, de la graisse et de l'eau de mer*** soutenue le 8 novembre 2023.

Références :

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

2. S. Montalvo, S. Fouvry, M. Martinez, ***A hybrid analytical-FEM 3D approach including wear effects to simulate fretting fatigue endurance: Application to steel wires in crossed contact***, Tribology International 187 (2023) 108713
   >> https://doi.org/10.1016/j.triboint.2023.108713

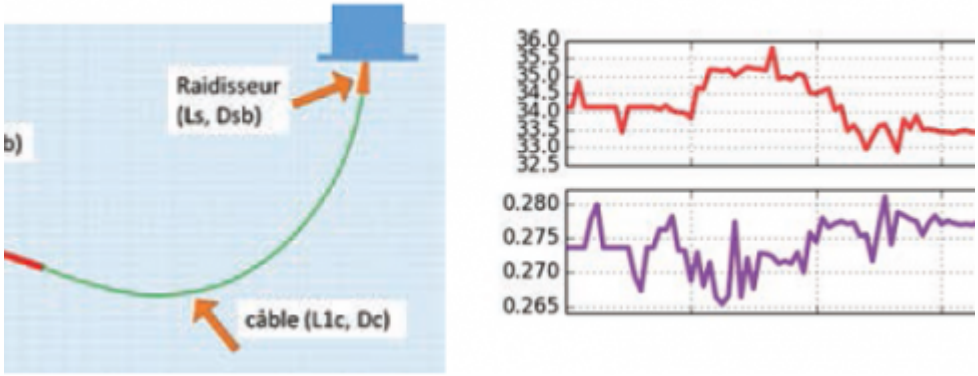
3. S. Montalvo, S. Fouvry, M. Martinez, ***Effect of zinc coating on the fretting fatigue endurance of crossed steel wires, submitted to Wear in December 2023***, submitted to Wear in December 2023

4. S. Montalvo, M. Martinez, S. Fouvry, ***Effect of zinc coating and grease on the fretting fatigue life of steel wires used in spiral steel ropes***, OIPEEC Conference, Lake Garda, Italy, 2024

Contact scientifique : michael.martinez@ifpen.fr

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

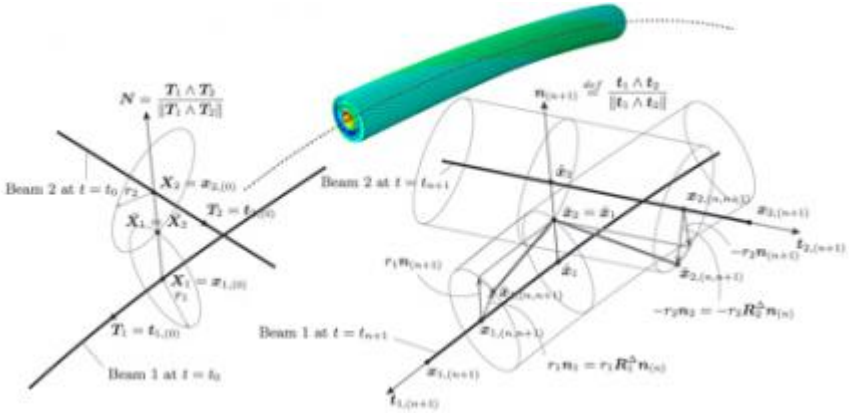


Optimisation du câble électrique d’une éolienne flottante

Les **technologies d'éoliennes flottantes**, comme celles codéveloppées par SBM[a] et IFPEN, permettent de **récupérer plus d’énergie** avec de meilleur

Énergies renouvelables | Énergies éoliennes

Sciences de l'ingénieur | Modélisation et simulation des systèmes | Mathématiques et informatique | Méthodes numériques et optimisation



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

Les lignes d’ancrage, le plus souvent constituées de câbles en acier au carbone, sont des éléments essentiels pour la stabilité de structures flottantes en mer, comme celles supportant des éoliennes. Pour pallier le risque de rupture en service, des lignes redondantes sont généralement prévues à la conception, ce qui entraîne un surcoût notable...

Essais mécaniques et thermiques | **Mécanique des solides** | **Méthodes numériques et optimisation**

VS6 - Eoliennes flottantes : mieux comprendre le comportement des câbles d’ancrage en acier

Le trafic routier urbain est une source significative d'émissions de polluants qui impacte la qualité de l'air. Pouvoir prédire la dispersion de ces émissions représente un enjeu important à la fois pour évaluer les expositions réelles et pour aménager les plans de circulation.

Dans ce but, un travail doctoral a proposé une chaîne de modélisation permettant de simuler les écoulements fortement turbulents à l'échelle micro-urbaine et d'obtenir des cartes spatiales bi-dimensionnelles de concentration de polluants (Figure 1) [1].

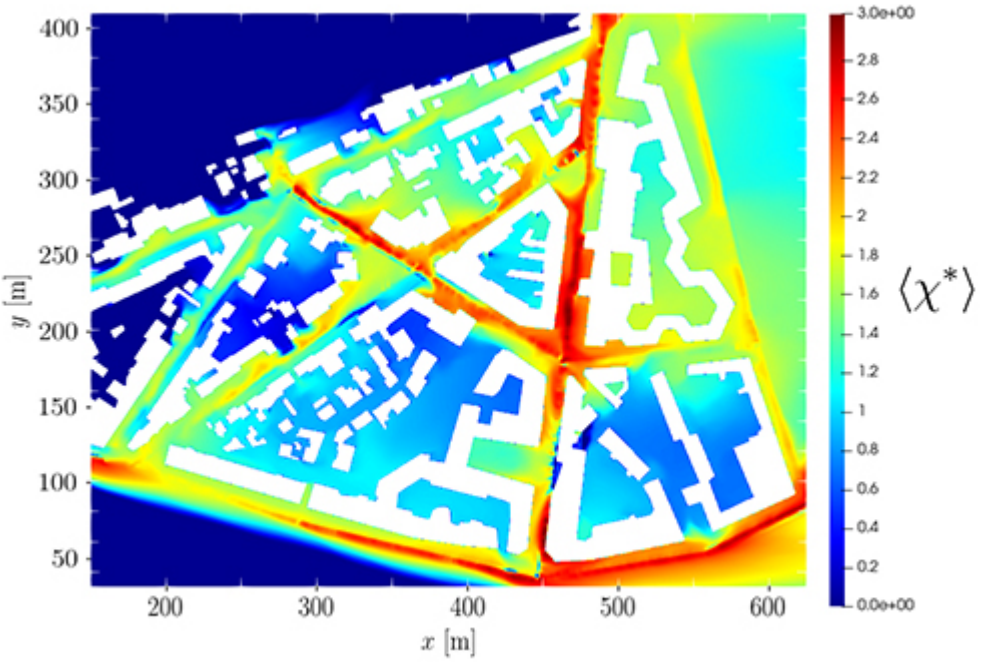


Figure 1 : Exemple de carte de concentration de polluants simulée par la chaine de calcul décrite dans [1] pour un quartier de la ville d'Issy-les-Moulineaux.

L'élaboration de ces cartes fait intervenir différentes variables dites incertaines (càd non ou mal connues a priori): variables météorologiques (direction ? et force du vent *U?*) et variables liées au trafic (volume de trafic q, limitation de vitesse v_{max} et proportion de véhicules diesel et essence ?). Certaines sont plus influentes que d'autres sur les sorties prédites par le modèle et leur identification se fait par le biais de méthodes d'analyse de sensibilité, une des thématiques abordées dans le cadre du consortium CIROQUO[2].

Concernant ces méthodes, l'approche classique consiste à calculer un indice de sensibilité usuel (comme les indices de Sobol[3]) sur une discrétisation de l'espace pour obtenir des cartes de sensibilité. Dans le cadre d'une autre thèse CIROQUO/IFPEN[4], une nouvelle famille d'indices de sensibilité adaptée à des sorties de modèles, qui sont non pas des scalaires mais des ensembles, a été proposée [2] et mise en œuvre pour cette application [3]. Au lieu de produire des cartes de sensibilité, cette nouvelle approche caractérise l'influence des différents paramètres d'entrée sur un ensemble aléatoire. Ici, l'ensemble considéré est tri-dimensionnel, avec d'une part les coordonnées spatiales (x,y) et d'autre part le niveau de concentration en polluants, tel que calculé à partir de différentes valeurs des variables incertaines. Ses performances ont été comparées avec des méthodes issues de la littérature : les indices de Sobol (après adaptation aux ensembles) et les indices dits *universels* qui peuvent s'appliquer à tous types de variables.

Les résultats de cette comparaison sont présentés à la Figure 2 et montrent tout d'abord que les différentes approches fournissent des résultats similaires pour ce qui est de classer l'influence des variables d'entrée (*ranking*). Cependant, la nouvelle méthode proposée permet également de statuer sur le caractère négligeable ou non des variables via un test statistique (*screening*). Il en résulte une réduction potentielle du nombre de variables à étudier. De plus, les intervalles de confiance obtenus sur les prédictions des indices sont globalement plus faibles qu'avec les autres approches [3].

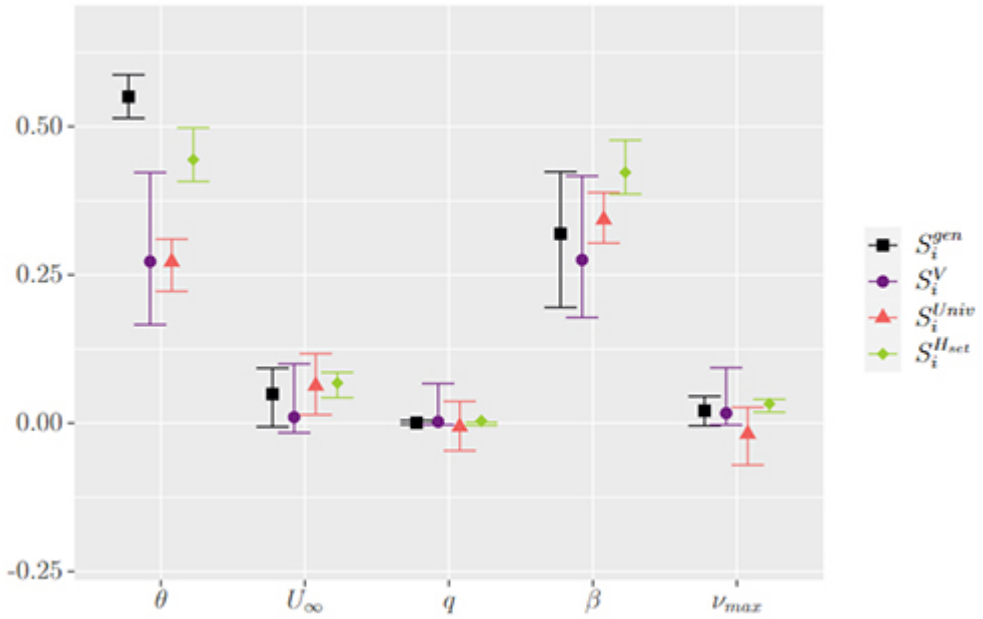


Figure 2 : Différents indices de sensibilité globaux des 5 variables incertaines servant au calcul de la carte de concentration de polluants. Le nouvel indice proposé est en vert (voir [3]).

En conclusion, la nouvelle approche proposée permet de statuer quant à l'aspect négligeable ou pas d'une variable, puis de classer les variables restantes par degré d'importance. Enfin, cette nouvelle méthode présente des perspectives intéressantes pour d'autres applications nécessitant de connaître l'influence de variables incertaines au cours d'une optimisation robuste[5] [2].

[1]- Thèse de **Mathis Pasquier**, ***Quantification d'incertitudes pour la dispersion turbulente de polluants liés au trafic routier à l'échelle micro-urbaine***, Université Aix Marseille, soutenue le 21 Décembre 2023.
[2]- Consortium Industrie et Recherche pour l'Optimisation et la Quantification d'incertitude pour les données onéreuses, https://ciroquo.ec-lyon.fr/
[3]- Indice de sensibilité d'une variable de sortie à une variable d'entrée (basé sur une décomposition de variance).
[4]- Thèse de Noé Fellmann, Analyse de sensibilité des problèmes d'optimisation sous incertitudes, Ecole Centrale Lyon (en cours).
[5]- C'est-à-dire une optimisation pour laquelle l'ensemble admissible des solutions est défini par des contraintes dépendantes de variables incertaines.

Références :

1. Mathis Pasquier, Stéphane Jay, Jérôme Jacob, Pierre Sagaut. ***A Lattice-Boltzmann-Based Modelling Chain for Traffic-Related Atmospheric Pollutant Dispersion at the Local Urban Scale.*** *Building and Environment*, 2023, 242, pp.110562
   >> 10.1016/j.buildenv.2023.110562

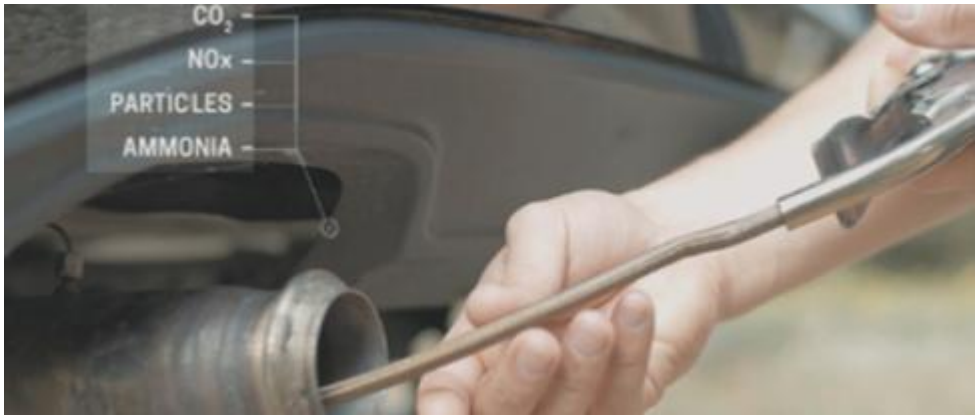
2. Noé Fellmann, Christophette Blanchet-Scalliet, Céline Helbert, Adrien Spagnol, Delphine Sinoquet. ***Kernel-based sensitivity analysis for (excursion) sets***, *Technometrics*, 2024, 1–13
   >> 10.1080/00401706.2024.2336537

3. Noé Fellmann, Mathis Pasquier, Céline Helbert, Adrien Spagnol, Delphine Sinoquet, Christophette Blanchet-Scalliet, ***Sensitivity analysis for sets: application to pollutant concentration maps***. 2023
   >> hal-04312097

Contacts scientifiques : adrien.spagnol@ifpen.fr et Delphine Sinoquet

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

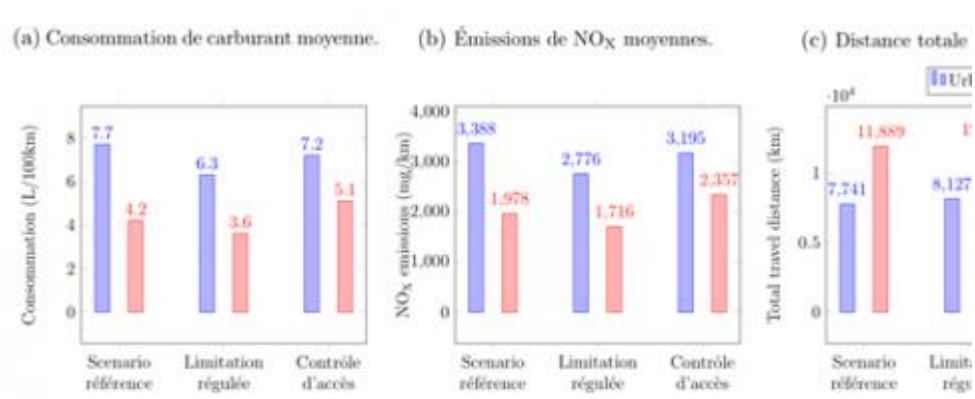
VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Emissions du transport routier : une recherche intégrée pour la qualité de l’air !

Selon l’OMS, 7 millions de décès prématurés par an dans le monde sont liés à la mauvaise qualité de l’air, problème auquel le transport routier contribue significativement. Grâce aux évolutions règlementaires et technologiques, ainsi qu’au renouvellement du parc automobile, les émissions de ce secteur sont certes en baisse ces dernières années. Toutefois celui-ci reste un fort contributeur à la dégradation de la qualité de l’air...

Technologie de la combustion et des moteurs | **Modélisation et simulation des systèmes**



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

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...

Modélisation et simulation des systèmes | **Méthodes numériques et optimisation**



Recherche fondamentale

Actualités février 2023

Qualité de l’air, consommation de carburant, fluidité du trafic : la régulation de vitesse en milieu urbain démontre ses bénéfices

Modélisation et simulation des systèmes | Méthodes numériques et optimisation

VS7 - Analyse de sensibilité de cartes de concentration de polluants vis-à-vis des conditions météorologiques et des paramètres de trafic

Le calcul haute performance ou HPC (High-Performance Computing) est un champ scientifique qui concerne à la fois les mathématiques et l'informatique, et dont l'application touche de nombreux domaines tels que l'énergie, la mobilité ou l'environnement. Dans tous ces domaines, le besoin de simuler des phénomènes physiques à grande échelle s'appuie en effet sur des modèles mathématiques qui sont gourmands en temps de calcul et en espace de stockage.

Le but du HPC est alors d'optimiser l'utilisation des ressources - machines, logiciels, algorithmes, méthodologies de développement, etc. - pour permettre de traiter, de manière précise et rapide, des problèmes complexes et massifs[1] issus d'applications très variées.

Ces simulations se font à l'aide de supercalculateurs[2] qui disposent de CPU[3] embarquant un grand nombre de cœurs[4] (de 18 pour Ener440 à 64 pour Irene et 96 pour Adastra).

Malgré leur puissance intrinsèque, la question se pose désormais de calculer plus efficacement avec ces machines, leurs processeurs multi-cœurs, leur hiérarchie mémoire complexe et leurs unités de calcul sophistiquées. Cela concerne notamment la synchronisation rapide et efficiente des cœurs.

La synchronisation en mémoire partagée est un sujet ancien et de nombreuses méthodes ont été proposées, que l'on retrouve dans différents compilateurs utilisés en HPC. Pour la parallélisation classique d'un code en mémoire partagée, la synchronisation des cœurs vise d'une part à organiser le bon ordre des calculs (par l'insertion de barrières[5]) et d'autre part à garantir la capacité à combiner les résultats produits par l'ensemble des cœurs (pour pouvoir les réduire en un seul résultat). Dans tous les cas, le temps qui y est consacré doit être minimal, mais, pour des processeurs avec un grand nombre de cœurs, le surcoût en temps de calcul lié à l'utilisation intensive de ces mécanismes de synchronisation standard de compilateurs (comme GCC ou Intel) est significativement élevé. Ils peuvent même devenir des goulots d'étranglement des performances pour les codes massivement parallèles.

La Figure 1 illustre la barrière de synchronisation Extended-Butterfly, proposée dans le cadre d'une thèse[6] réalisée à IFPEN, pour des codes parallèles en mémoire partagée afin de répondre à cette problématique. Son originalité réside dans la mise en place d'une synchronisation par groupes[7] sur deux niveaux : une synchronisation intra-groupe puis inter-groupe [1]. Le nombre d'étapes nécessaires à la synchronisation dépend du logarithme du nombre de groupes et cela conduit à ce que pour nos 7 cœurs 4 étapes soient suffisantes pour les synchroniser.

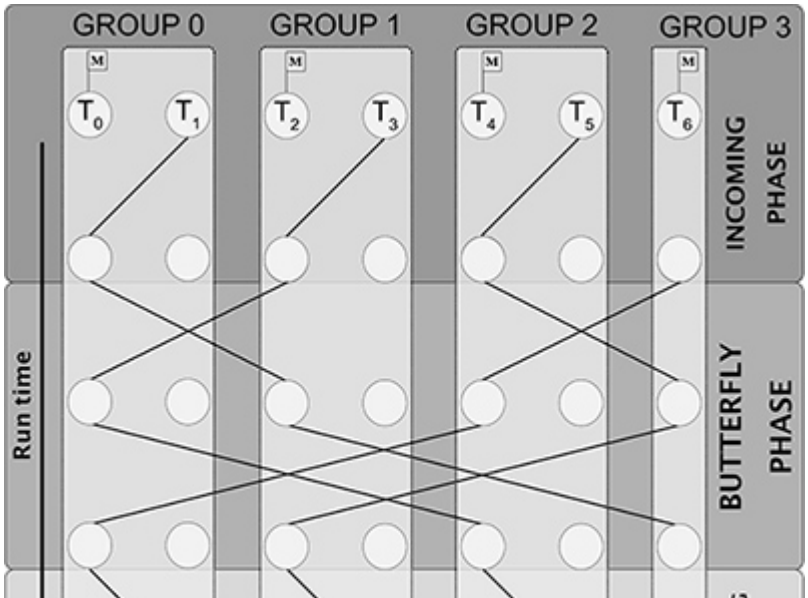


Figure 1 : Schéma d'échanges de notifications entre les cœurs dans la barrière Extended Butterfly avec 7 cœurs de calcul.
Les traits foncés symbolisent l'envoie d'une notification d'un cœur à un autre.
???La barrière se fait en 3 étapes :
- une étape d'entrée,
- une étape dans Butterfly
- et une étape de sortie.
Seuls les cœurs représentés avec un drapeau sont autorisés à entrer dans la phase Butterfly pendant que leur partenaire attend leur notification de la phase de sortie.

Les résultats des tests de performance pratiqués (Figure 2) montrent que cette barrière (histogramme bleu clair) nécessite un temps de synchronisation (ou latence) plus faible que la barrière de l'interface de programmation OpenMP avec les compilateurs GCC (histogrammes bleu foncé).

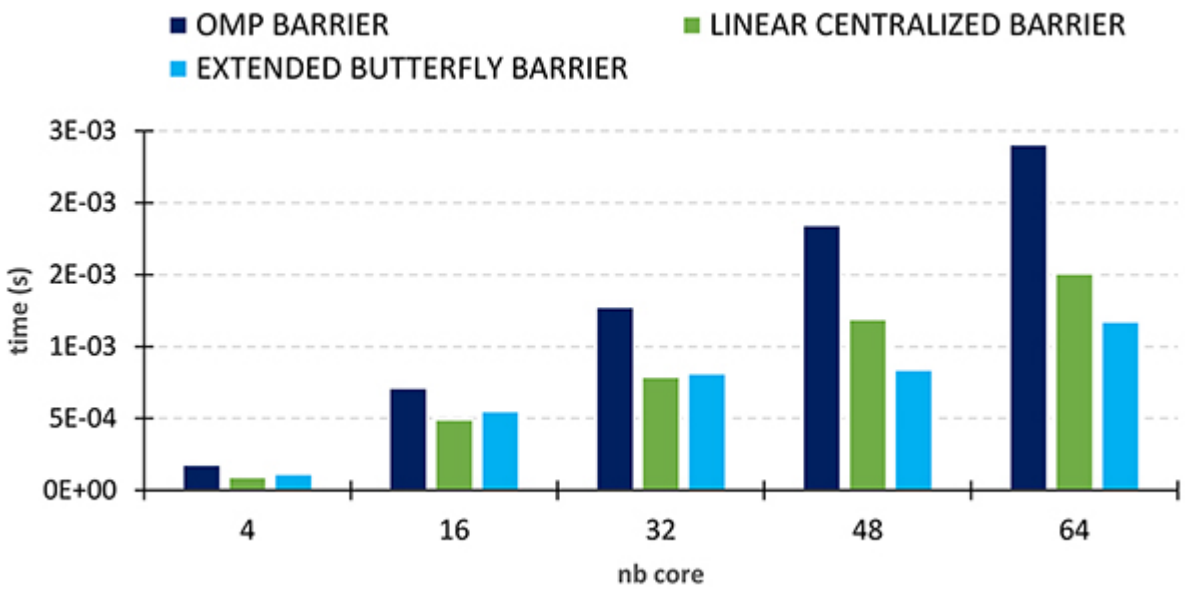


Figure 2 : Résultat des temps de synchronisation des barrières sur le processeur AMD Milan.

Notre barrière Extended Butterfly a ensuite été utilisée comme support pour les opérations de réduction. Notre méthode Extended Butterfly Reduction est jusqu'à 4 fois plus rapide (pour 64 cœurs) que la réduction d'OpenMP avec GCC sur le processeur AMD Milan (Figure 3).

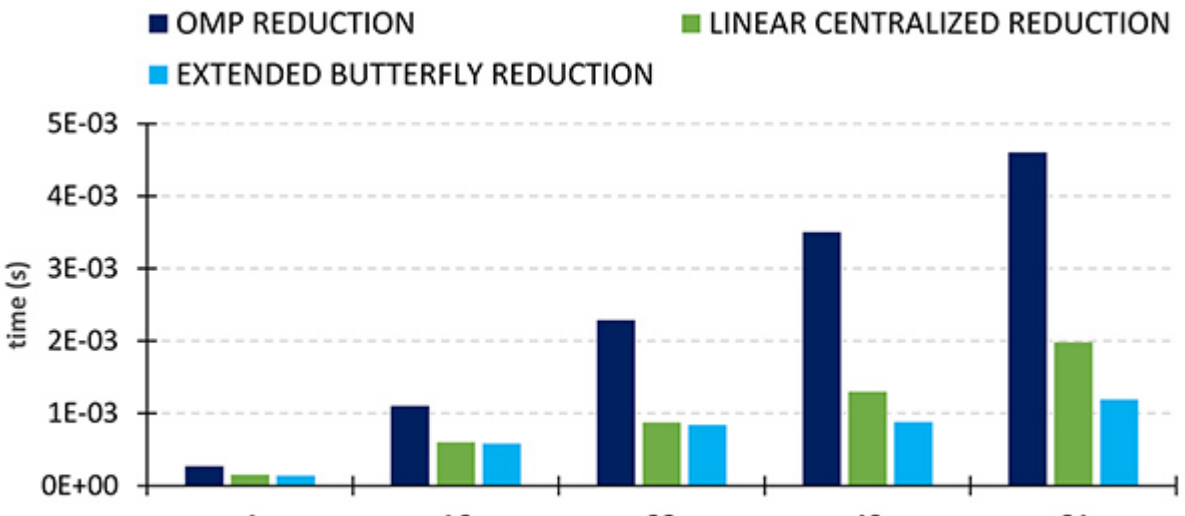


Figure 3 : Résultat des temps des réductions sur le processeur AMD Milan.

La barrière et la réduction Linear Centralized (les histogrammes en vert) représentent les anciennes méthodes mises en place dans MCGSolver[8], la librairie de solveurs linéaires massivement parallèle d'IFPEN. Là aussi, les nouvelles méthodes employées dans Extended-Butterfly conduisent à des performances notablement meilleures pour un nombre de cœurs supérieurs à 40.

En résumé, la puissance de calcul apportée par les nouveaux processeurs, grâce notamment aux grands nombres de cœurs qu'ils embarquent, pose la question de leur exploitation optimale. Notre nouvelle méthode Extended-Butterfly propose une approche efficace pour répondre à cette problématique, en gagnant sur plusieurs aspects au niveau de la synchronisation des cœurs. Ces méthodes ont été intégrées dans la librairie MCGSolver.

[1]- Utilisant de grandes quantités de données.
[2]- Comme Ener440 (IFPEN), Irene (TGCC) ou Adastra (GENCI-CINES), la machine la plus récente qui figure dans le top 3 du Green500 de 2022.
[3]- Unité centrale de calcul (Central Processing Unit).
[4]- Un cœur est un ensemble de circuits capables d'exécuter des programmes de façon autonome.
[5]- Action visant à suspendre le calcul de certains cœurs en attendant les autres.
[6]- **A. Mohamed El Maarouf**, ***Factorisation incomplète et résolution de systèmes triangulaires pour des machines exploitant un parallélisme à grain fin. Université de Bordeaux***, 2023. HAL : tel-04429547 >> https://theses.hal.science/tel-04429547
[7]- Notion algorithmique introduite dans le cadre de ce travail.
[8]- Multi-Core multi-Gpu Solver.

Référence :

1. A. Mohamed El Maarouf, L. Giraud, A. Guermouche, T. Guignon, ***Combining reduction with synchronization barrier on multi-core processors***, CCPE Journal, 2023.
   >> DOI : 10.1002/cpe.7402

Contacts scientifiques : aboul-karim.mohamed-el-maarouf@ifpen.fr et thomas.guignon@ifpen.fr

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



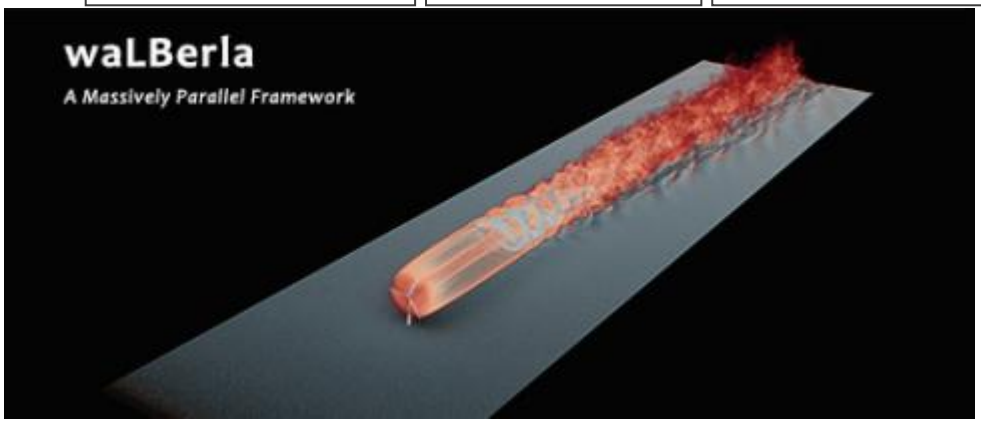
Recherche fondamentale

Actualités juillet 2018

Numéro 33 de Science@ifpen - Performance des codes de calcul

Science@ifpen

Énergies renouvelables | Énergies éoliennes | Hydrocarbures responsables



VS8 - La simulation des parcs éoliens « massivement » accélérée

Dans le domaine de l'énergie éolienne, les simulations par LES (Large Eddy Simulations1) 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)...

Mécanique des fluides | **Méthodes numériques et optimisation** | **Calcul de haute performance**

VS8 - Synchroniser rapidement les cœurs : un enjeu d’efficacité

Alors que l'Union Européenne vise la neutralité climatique d'ici 2050 (c'est-à-dire zéro émission nette de gaz à effet de serre), les émissions mondiales de CO_2 liées aux transports, qui représentent un quart du total, continuent à augmenter. Pour remédier à cela et faire face à l'urgence climatique, les améliorations technologiques ou la taxe carbone ne semblent pas suffisantes, et un changement est également nécessaire en matière de comportement.

Le projet FRAME[1] porte sur la prise en compte des considérations environnementales dans les décisions de voyage des particuliers et s'intéresse pour cela aux nouvelles approches, moins interventionnistes (prix, taxes, réglementation), préconisées dans la littérature telles que les politiques d'information et de communication. L'introduction de ces « coups de pouce » (*nudge*, en anglais), dont l'effet direct reste marginal, peut avoir un effet significatif pour augmenter les sensibilités environnementales et compléter les politiques plus interventionnistes. Parmi les types de *nudge* les plus connus figure l'effet de cadrage qui cherche à améliorer l'efficacité d'une campagne de communication en lui associant une suggestion pour modifier la perception de certains aspects du problème considéré et orienter ainsi la décision. Par exemple, les conséquences d'un comportement peuvent être présentées soit en termes de gains attendus, grâce à l'adoption du changement, soit en termes de pertes subies du fait de sa non-adoption.

Dans le cadre du projet FRAME, l'effet du cadrage de la valence des attributs - *i.e.* la description d'une même information (mais de manière soit positive soit négative) sur les préférences des individus en termes de conditions de voyage - a été testé *via* une Expérience de Choix Discret[2] [1], spécialement conçue à cet effet. Différents traitements ont permis de déterminer si ce type de cadrage pouvait ou non avoir un impact pour réduire les émissions de CO_2 liées aux transports. Plus facile à mettre en œuvre que des leviers traditionnels, tels que les taxes, un tel *nudge* ne repose pas sur l'hypothèse forte selon laquelle les individus seraient entièrement rationnels.

L'expérience (DCE) a été menée sur un échantillon représentatif de la population française (âge, genre, activité professionnelle : au total, 1 032 personnes âgées de 18 à 75 ans résidant en France métropolitaine). Un scénario hypothétique était présenté pour un voyage à des fins privées utilisant les transports en commun, avec une origine et une destination fixes, et avec deux alternatives en termes de modes de déplacement via plusieurs « carte de choix » (cf. Tableau 1).

	Option 1	Option 2
Durée	6h35	3h00
Prix	50 €	175 €
Un siège d'écart	Oui	Non
CO2	39 kg	51 kg

Tableau 1 : Exemple de carte de choix.

En tout ce sont dix cartes de choix qui ont été présentées à chaque répondant, avec diverses combinaisons de temps de trajet, de coût, de distanciation sanitaire et d'émissions de CO_2 (cf. Tableau 2).

Attribute	Levels			
Price (€)	50	75	125	175
Duration (min)	180	235	305	395
CO2 (kg)	30	39	51	66
Sanitary (One seat gap)	Yes	No	_	_

Tableau 2 : Niveaux des attributs proposés dans les cartes de choix.

Les principaux effets de cadrage étudiés étaient le gain et la perte sur deux attributs différents : le temps de trajet et la quantité de CO_2 émise.

Les répondants ont dû réaliser des choix successifs à partir des cartes de choix proposées dans le but de leur faire révéler leurs préférences pour les différents attributs. Les résultats ont été obtenus à l'aide de méthodes économétriques et statistiques dédiées appartenant au corpus des modèles de choix discrets (cf. [2] pour plus de détails). La cohérence des coefficients des attributs a été vérifiée en analysant leurs signes et leurs valeurs relatives.

Il ressort tout d'abord de l'analyse que les personnes interrogées tentent avant tout de minimiser le prix et la durée de leur voyage, le prix ayant une influence deux fois plus forte que la durée, puis de maximiser les mesures sanitaires dont elles peuvent bénéficier. Le critère CO_2 se classe en dernier mais est malgré tout pris en compte par les intéressés.

Toutefois, les résultats indiquent que si l'information sur les émissions de CO_2 est présentée de manière négative (cadrage en perte), cela augmente de manière significative les comportements pro-environnementaux des répondants dans leurs choix de déplacement. A l'inverse, un cadrage en gain de ces mêmes émissions n'a pas d'effet statistiquement significatif sur ces comportements.

En termes de politiques publiques, l'enseignement de ce travail est double. Premièrement, si les cadrages en perte exercent bien une influence sur les décisions des individus, cela ne semble pas être le cas des cadrages en gains. Ce résultat demandera à être confirmé mais, en permettant de mieux comprendre les priorités de choix des voyageurs, il pourrait servir à concevoir des politiques pro-environnementales plus appropriées. Deuxièmement, un bénéfice du cadrage en perte plus important pour le CO_2 que pour la durée du trajet a été observé. Cet effet pourrait s'expliquer par le caractère plus complexe et moins concret de cet attribut (par exemple le kg d'émissions de CO_2) par rapport à un attribut déjà bien connu et identifié comme la durée du temps de trajet. S'il se confirmait que cette différence résulte du caractère abstrait de l'indicateur relatif aux émissions de CO_2, il serait intéressant de trouver une unité de mesure plus compréhensible pour communiquer à leur propos.

[1]- Projet financé par l'ADEME (2021 - 2024) : *cadrage de l'inFoRmAtion pour la promotion d'une Mobilité durablE*. En partenariat avec l'Université Gustave Eiffel, l'Université de Nantes et l'Université de Rennes.
[2]- Ou DCE, pour *Discrete Choice Experiment*.
[3]- Pertinence et significativité statistique.

Références :

1. Collet C., Gastineau P., Chèze B., Mahieu P-A., Martinez F. (2023), ***Combining economics and psychology: Does CO_2 framing strengthen pro-environmental behaviors ?***, Ecological Economics, Volume 214.
   >> https://doi.org/10.1016/j.ecolecon.2023.107984

2. Chèze, B., Collet, C., Paris, A. (2021), ***Estimating discrete choice experiments: theoretical Fundamentals***,
   >> Les Cahiers de l'économie n° 142, Séries Working Paper IFPEN.

Contact scientifique : Benoît Chèze

>> NUMÉRO 54 DE SCIENCE@IFPEN

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

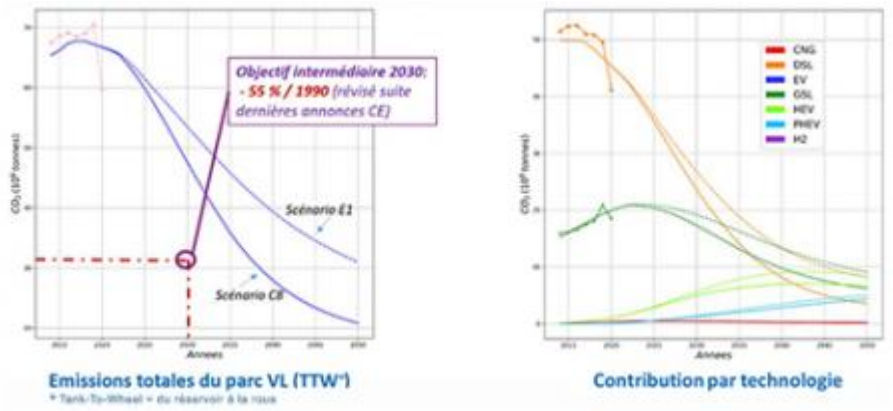


Recherche fondamentale

Actualités décembre 2023

Le programme de Recherche "Digitalisation et Décarbonation des Mobilités" est lancé !

Communiqués de presse



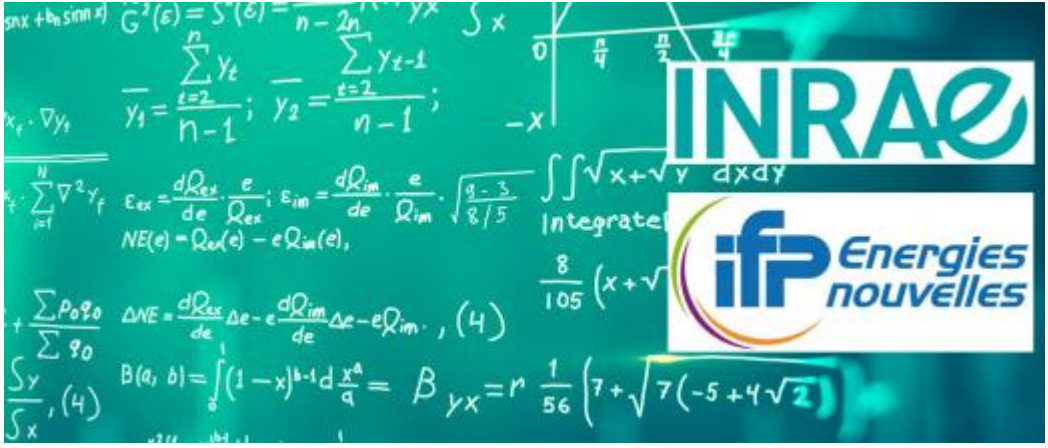
VS9 - De nouveaux moyens pour l’analyse prospective du Transport Routier français

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 - Economie comportementale : un coup de pouce aux mobilités bas-carbone

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

Caractérisation in situ de la genèse des sites actifs des catalyseurs d’hydrotraitement
Boehmite rhapsody ! Une précipitation tout en maîtrise
La corrosion, un des grands enjeux de la transition énergétique, mobilise les efforts de recherche d’IFPEN
Numéro 54 de Science@ifpen - La recherche fondamentale au service de l’innovation
28 mars 2024

Lien vers la page web :