Science
@ifpen
N° 57 - Février 2025

Rédigé le 28 février 2025

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



Dans ce numéro spécial de notre newsletter Science@IFPEN, nous mettons à l’honneur les travaux de certains de nos chercheurs qui ont obtenu leur diplôme d’habilitation à diriger des recherches.

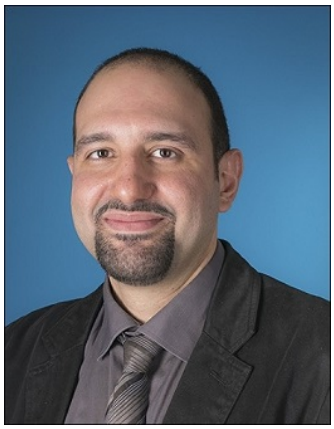
L'HDR n'est pas seulement un titre, c'est une reconnaissance de la capacité à former la prochaine génération de chercheurs, à piloter des projets d'envergure et à contribuer de manière significative à la levée des verrous de connaissance, dans un cheminement scientifique qui va de la recherche fondamentale au développement de solutions technologiques. Chaque titulaire d'une HDR au sein de notre institut incarne notre engagement dans la recherche de solutions pour la transition énergétique et écologique. En mettant en avant ces parcours de recherche, nous voulons non seulement reconnaître leur contribution remarquable, mais également inspirer la prochaine génération de scientifiques, et en particulier nos doctorants, à poursuivre cette quête de l'innovation et de l'excellence.

La diversité des domaines disciplinaires et des applications que reflète l’ensemble de ces textes montre la pertinence des compétences de nos chercheurs qui ont su bâtir, à partir de l’héritage des activités historiques de l’institut, tout un ensemble de méthodologies et de concepts scientifiques qui trouvent toute leur place pour contribuer à la transition énergétique et écologique.

Bonne lecture à tous,

Benjamin Herzhaft
Directeur général adjoint, en charge de la recherche et de la formation

LES BRÈVES



Arash Farnoosh

Analyse Économique des Systèmes Énergétiques :

une approche régionale à grande échelle (HDR 2021)

Comme l'indique son titre, mon travail de recherche se concentre sur **l'analyse économique des systèmes à grande échelle**, c'est-à-dire à des cibles telles que les systèmes énergétiques des régions, des pays, des territoires et des grandes agglomérations ou des vastes zones métropolitaines. Quant à l'analyse économique, elle ne se limite pas aux aspects économiques, purs et autonomes. Elle inclut aussi des problématiques liées aux aspects géopolitiques, techniques et environnementaux ainsi bien sûr qu'aux politiques énergétiques. Le processus de modélisation mathématique et d'analyse économique déployé tout au long de mon parcours de recherche intègre donc l'ensemble de ces considérations.

Ainsi, en fonction de la nature des incertitudes existantes dans les systèmes étudiés, **des méthodes de programmation linéaire** [1] et **de programmation dynamique et d'optimisation** [2] ont été sélectionnées. Cependant, au fur et à mesure de l'avancée de ces recherches vers des systèmes plus compétitifs et plus écologiques (en raison de la part plus importante des énergies renouvelables) mais aussi plus imprévisibles, les méthodes ont dû prendre en compte de plus en plus d'incertitudes. C'est la raison principale pour laquelle ces méthodes ont été combinées avec des approches plus innovantes telles que **l'optimisation distributionnelle robuste**[1] et **l'apprentissage statistique** (i.e. **les réseaux neuronaux**). Cette approche a débouché sur de nouveaux modèles (Figure 1) qui ont été déployés pour l'analyse des systèmes énergétiques des économies en développement rapide telles que l'Inde et la Chine [3].

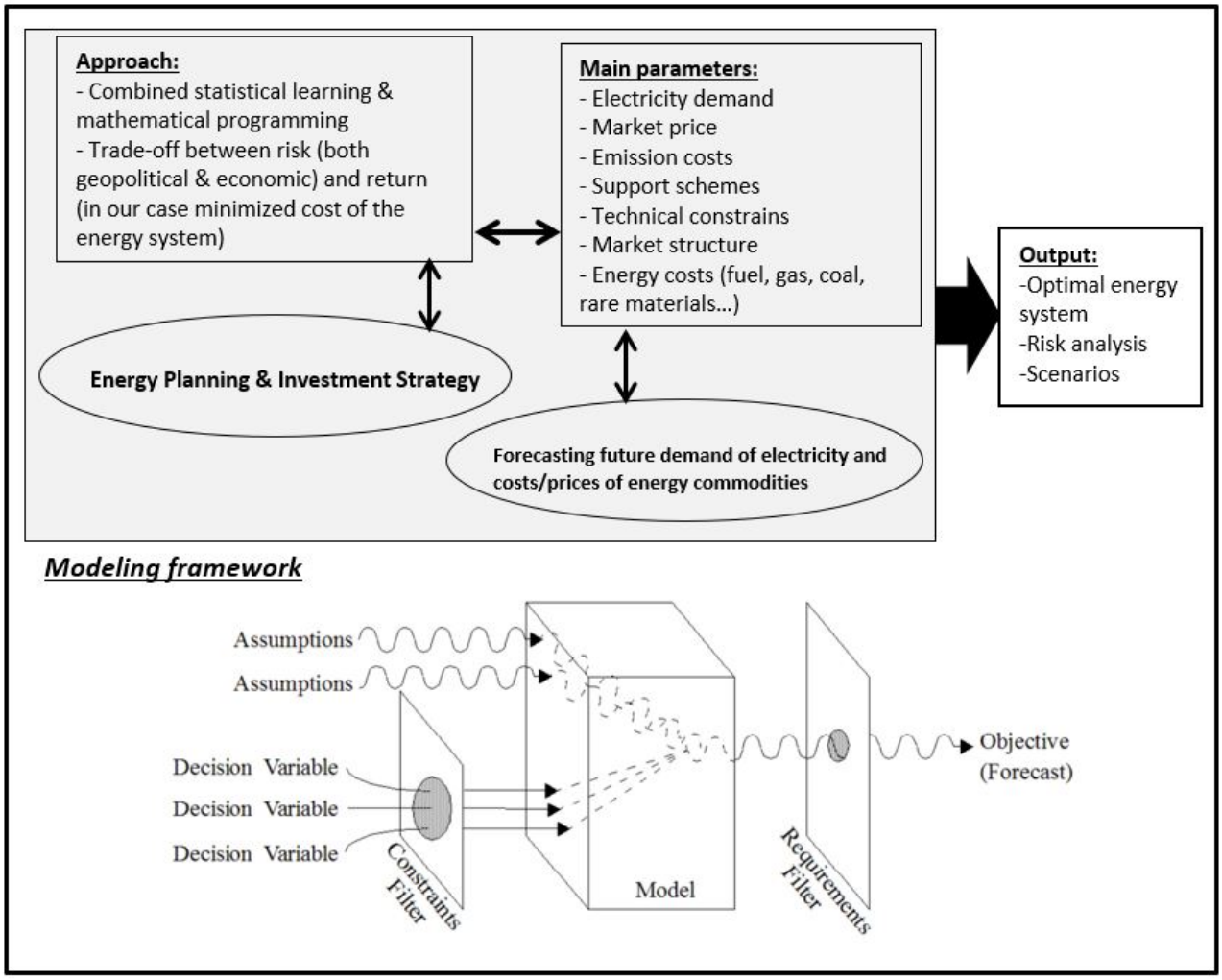


Figure 1– Structure du modèle d'analyse technico-économique des systèmes énergétiques

La planification à long terme et l'expansion durable des systèmes énergétiques à grande échelle dans des contextes très incertains présentent des défis importants en raison de la présence de divers types d'aléas. L'application de ces modèles va permettre d'améliorer la robustesse de notre analyse pour y faire face.

[1] L'optimisation distributionnelle robuste (DRO en Anglais) suppose que la distribution de probabilité régissant les paramètres incertains est inconnue mais appartient à un ensemble ambigu de distributions de probabilité.

Références :

1. Farnoosh A., Percebois J. and Lantz F., 2014, ***Electricity generation analyzes in an oil-exporting country: Transition to non-fossil fuel-based power units in Saudi Arabia***, ENERGY, Elsevier, 69, pp. 299–308.
   >> https://doi.org/10.1016/j.energy.2014.03.017

2. Farnoosh A., Yue Zhang et al., 2018, ***GIS-Based Multi-Objective Particle Swarm Optimization of Charging Station for Electric Vehicles – Taking a District in Beijing as an***

Example, ENERGY, Elsevier, 169, pp. 844–853.
>> https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.12.062

3. Farnoosh A. and Y. Zhang, 2019, ***Analyzing the Dynamic Impact of Electricity Futures on Revenue and Risk of Renewable Energy in China***, Energy Policy, Elsevier, 132, pp. 678–690.
>> https://doi.org/10.1016/j.enpol.2019.06.011

Pour en savoir plus : Arash Farnoosh

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Modélisation des grands systèmes énergétiques



Maria Romero-Sarmiento

Méthodologies analytiques pour la caractérisation de la matière organique :

Application à la caractérisation de roches mères-réservoirs complexes, des huiles, lubrifiants, polymères, microplastiques, inhibiteurs de corrosion et de dépôts solides présents dans les installations de géothermie (HDR 2021)

Le périmètre de mon HDR recouvre le champ de dix années de recherche à IFPEN lesquelles ont porté dans un premier temps sur les sujets liés aux hydrocarbures :
- la caractérisation de **la nanostructure de la matière organique sédimentaire** en fonction de **la maturité thermique** ;
- **le développement de la méthode Rock-Eval® Shale Play^{TM}** afin d'améliorer la caractérisation **de roches mères très riches en hydrocarbures liquides** ;
- l'élaboration d'une méthodologie analytique pour mieux estimer les hydrocarbures libres parmi ceux qui sont adsorbés au sein d'une roche mère très riche en hydrocarbures liquides.

Par la suite, mon travail s'est orienté vers d'autres problématiques, notamment liées aux nouvelles énergies et à l'environnement. Cela s'est traduit par le développement de procédures expérimentales pour caractériser entre autres : **les dépôts solides présents dans les installations de géothermie** [1], **les inhibiteurs de corrosion, les lubrifiants ou, plus récemment, les polymères (problématiques des microplastiques)** [2] ou encore **les microfibres textiles** [3].
Ceci a contribué à différents développements à IFPEN et en particulier :
- au **logiciel de modélisation de bassin TemisFlow^{TM}**, commercialisé par BeicipFranlab, en y intégrant de nouveaux modèles impliquant **des concepts de géochimie organique** (avec par exemple les modules de calcul de porosité organique et de potentiel d'adsorption du méthane) ;
- au **dispositif Rock-Eval®** (figure 1), commercialisé par Vinci Technologies, en développant de nouvelles méthodes d'analyse pour améliorer la caractérisation d'échantillons de diverses natures .
Mon parcours de recherche est à l'image du virage pris par IFPEN ces dernières années pour répondre aux enjeux de la transition énergétique et écologique.

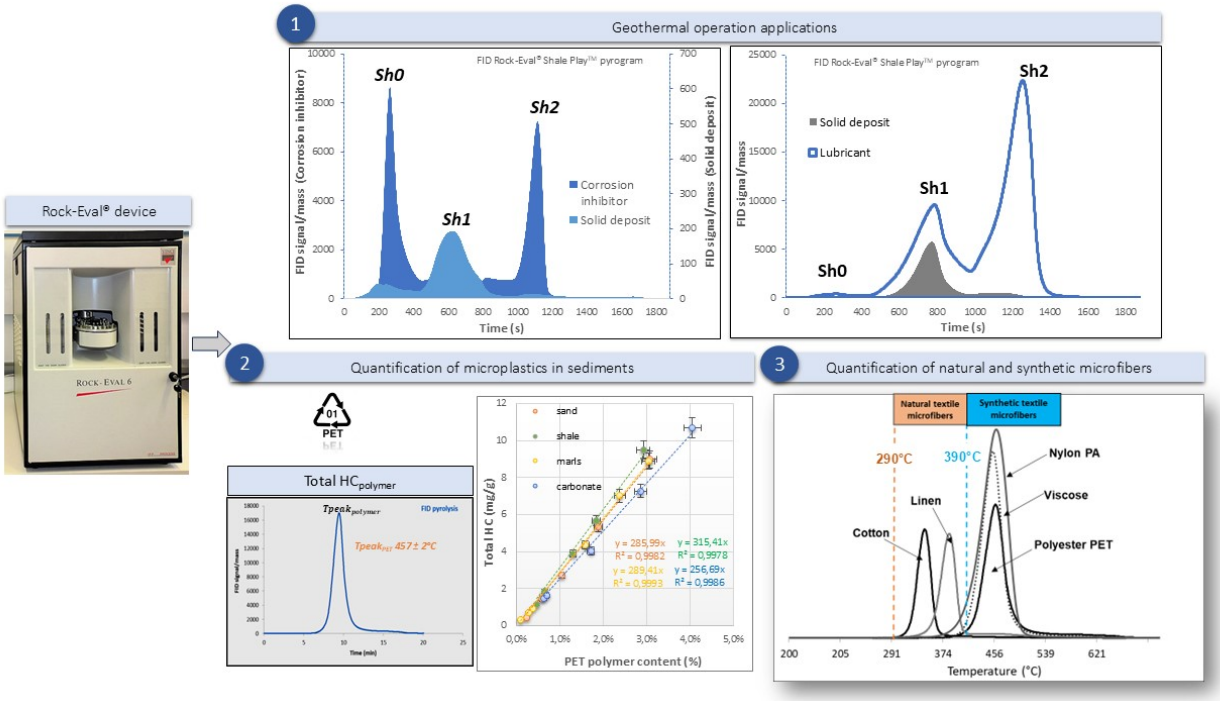


Figure 1 : Exemples d'applications du dispositif Rock-Eval® vers les nouvelles thématiques de sciences de la Terre et des technologies de l'environnement

Références :

1. Romero-Sarmiento, M.-F., Ravelojaona, H., Maubec, N. (2022). ***Corrosion inhibitors and lubricants characterization using the Rock-Eval® Shale PlayTM method: case studies to determine the origin of geothermal scales***. Geothermics 101, 102357.
   >> https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2022.102357

2. Romero-Sarmiento M.-F., Ravelojaona, H., Pillot, D., Rohais, S. (2022). ***Polymer quantification using the Rock-Eval® device for identification of plastics in sediments***. Science of the Total Environment 807, 151068.
   >> https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.151068

3. Romero-Sarmiento M.-F., Rohais, S. Dreillard, M. (2024). ***Quantification of textile microfibers from laundry wastewater using the Rock-Eval® device: Difference between natural and synthetic microfiber origin***. Science of the Total Environment 956, 177335.
   >> https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.177335

A contacter : Maria Romero-Sarmiento

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Caractérisation de matières organiques



Emmanuel Hache

Prix, cycle et rareté sur les marchés de matières premières : du pétrole aux matériaux de la transition énergétique

Une perspective historique, économique et géopolitique (HDR, 2021)

Le périmètre de mon HDR a couvert quinze années de recherche à IFPEN sur **les matières premières**, **les mécanismes de formation des prix sur les marchés** et plus particulièrement **l'étude des dynamiques de court, moyen et long terme** sur ces derniers. Elle a été en partie alimentée par les travaux développés dans le cadre du projet ANR **Generate** (Géopolitique des énergies renouvelables et Analyse Prospective de la Transition Énergétique) dont j'étais le porteur entre 2018 et 2020.

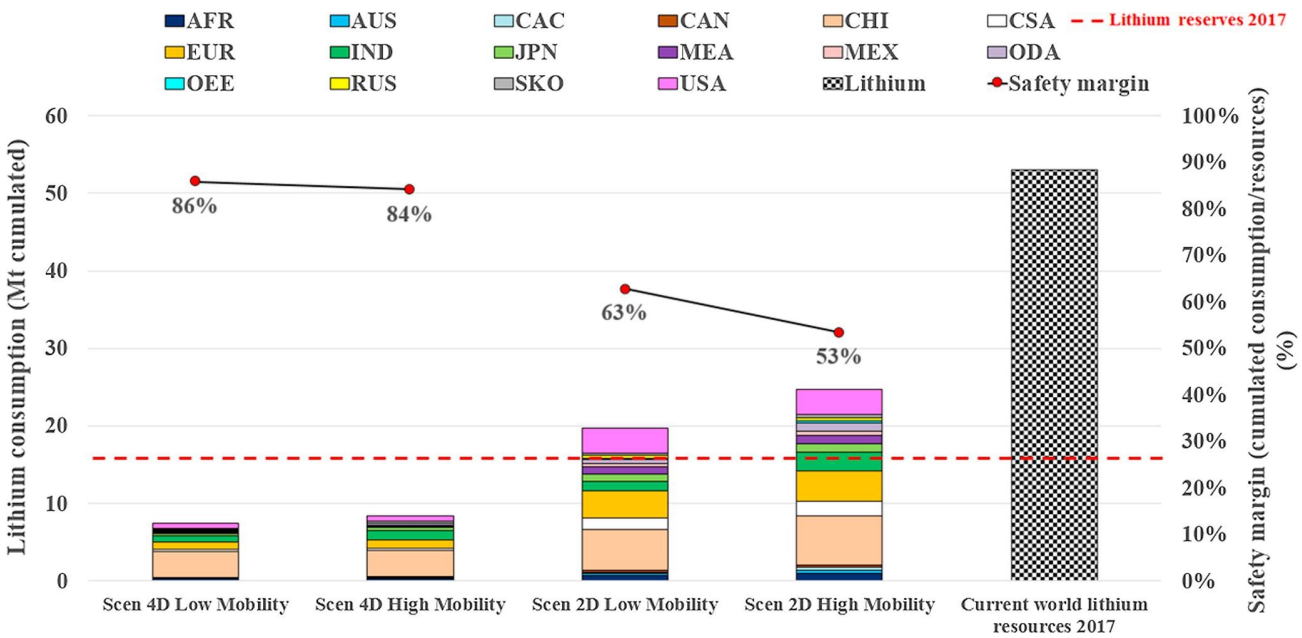
Trois contributions illustrent la démarche que j'ai adoptée.

Dans un contexte de transformations économique et géopolitique mondiale, la première d'entre elles s'est attachée à revisiter les facteurs de long terme pouvant influencer **les prix du pétrole** et **les principes de coordination entre acteurs**. Dans cette optique, elle a traité de **l'influence de l'Organisation des Pays Exportateurs de Pétrole** (**OPEP**) sur les marchés en fonction des différents régimes de prix observés depuis 1970, à l'aide de différentes méthodologies économétriques (cointégration, causalité à la Granger, analyse de données de panel) [1].

La deuxième contribution s'est intéressée aux **liens entre les marchés financiers et la dynamique des prix à court terme** en estimant **un modèle de chaîne de Markov à changement de régime**[1]. L'analyse portait spécifiquement sur les relations entre les prix *Spot* et *Futures* du WTI[2]aux Etats-Unis et a mis en avant le rôle de la spéculation notamment lors de la crise financière de 2007-2008 [2].

La troisième contribution recouvrait **l'évaluation de la criticité des matières premières** présentes dans les technologies bas-carbone à l'aide du modèle TIAM-IFPEN . Ces travaux ont permis de mettre en avant **la hausse marquée des besoins en ces ressources** et **l'importance de l'eau** à travers une modélisation des chaines de valeur des matériaux (bauxite, cobalt, cuivre, lithium, nickel, terres rares). Dans le cas du lithium par exemple (figure), nous observons ainsi, pour un scénario + 2°C avec une mobilité inchangée, une hausse de la consommation de cet élément représentant 47 % des ressources sur la période 2005-2050, soit une diminution de la marge de sécurité à 53 %, contre 63 % avec des changements opérés dans la mobilité [3].

[1] Type de modèle employé par les organismes de conjoncture pour l'analyse du cycle économique
[2] Le West Texas Intermediate (WTI) est une qualité ou un mélange de pétrole brut dont les prix au comptant et à terme servent de référence pour la fixation des prix du pétrole.



Marge de sécurité de lithium calculée en fonction de la consommation entre 2005 et 2050 et des ressources disponibles en 2017

L'obtention de l'HDR m'a permis de renforcer mon ancrage académique et de développer de nouveaux projets de recherche dont **le projet ANR Get More H2** (Géopolitique de la Transition énergétique et Modélisation mondiale économique et sociale des technologies de production d'hydrogène) qui s'étend sur la période 2023-2027, en partenariat avec le CEA, l'Université Paris-Nanterre et l'IRIS et que je coordonne.

Références :

1. Bremond, V., Hache, E., Mignon, V., (2012). ***"Does OPEC still exist as a cartel? An Empirical Investigation"***. Energy Economics, 34, 1, pp.125-131.
   >> https://doi.org/10.1016/j.eneco.2011.03.010

2. Hache, E., Lantz, F., (2013). ***"Speculative Trading & Oil Price Dynamic: A Study of the WTI Market"***, Energy Economics, 36, pp.334-340.
   >> https://doi.org/10.1016/j.eneco.2012.09.002

3. Hache, E., S., Seck, G., Simoën, M., Bonnet, C., Carcanague, (2019), ***"Critical raw materials and transportation sector electrification: A detailed bottom-up analysis in world transport"***, Applied Energy, 40, pp.6-25.
   >> https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.02.057

Pour en savoir plus : Emmanuel Hache

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Marché des matières premières : au cœur des enjeux énergétiques



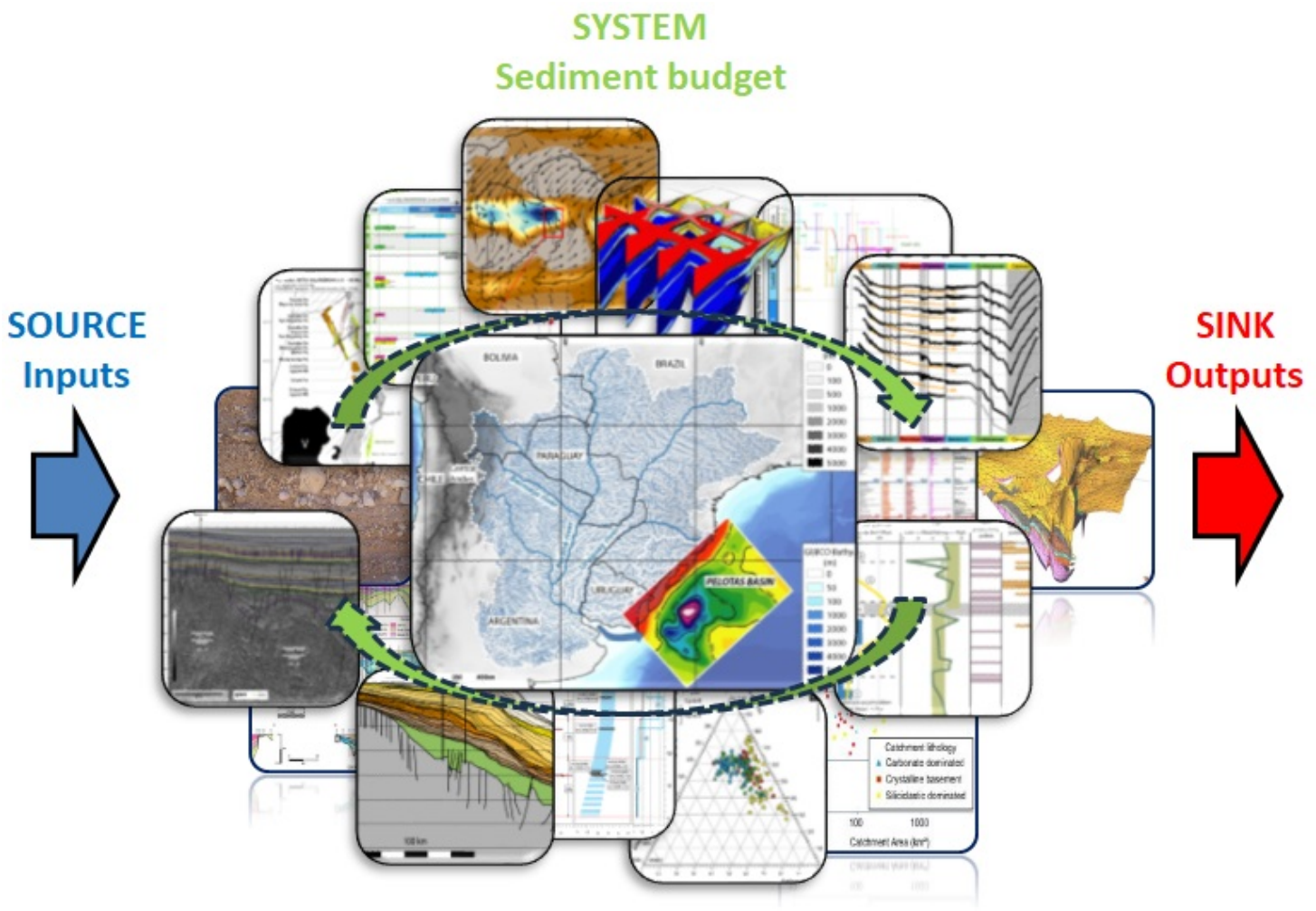
Sébastien Rohais

Budgets sédimentaires : concept, méthodes et intégration en analyse de bassin sur un continuum terre-mer (HDR 2022)

Dans un compartiment sédimentaire donné[1], **le budget sédimentaire consiste à évaluer les apports, les transferts et les exports sédimentaires, et à les assimiler au gain ou à la perte nette sur une unité de temps** (figure). Les budgets sédimentaires sont très largement utilisés en géosciences :

- depuis longtemps en exploration pétrolière pour prédire les occurrences et qualités des réservoirs pétroliers ou de roches mères ;
- plus récemment, dans le domaine de l'environnement, lors de l'étude des risques, afin d'anticiper les érosions côtières et d'ajuster l'aménagement du territoire dans un contexte de changement climatique.

Souvent déployés à l'échelle du compartiment sédimentaire, **ces budgets, lorsqu'ils sont intégrés à plus grande échelle, offrent la possibilité d'acquérir une vision globale des systèmes sédimentaires**. Ainsi, par le développement et la mise en œuvre de méthodes et d'outils numériques, les travaux de mon HDR visaient à quantifier ces budgets à l'échelle des bassins sédimentaires[2] sur le continuum terre-mer (voir figure). L'approche adoptée a contribué à déterminer des conditions limites pertinentes et permis de mieux comprendre les interactions entre les différents compartiments en s'appuyant sur des bilans globaux.



[1] Un compartiment sédimentaire est une zone géologique distincte qui est caractérisée par des conditions de dépôt propres

[2] Un bassin sédimentaire est une dépression de la surface terrestre, souvent très étendue où les sédiments s'accumulent sur une longue période. Ils peuvent contenir plusieurs types de roches sédimentaires.

Ces travaux ont trouvé des applications directes à IFPEN pour :

- **la simulation de bassin** : de manière à caractériser la dynamique de déformation des bassins sédimentaires (comme par exemple les vitesses d'enfouissement ou de soulèvement), avec des implications sur la détermination de la thermicité[3]), du calendrier de déformation[4] et/ou des périodes de génération de sable, toutes informations qui sont essentielles en exploration de bassin et de réservoir [1, 2] ;
- **la simulation de réservoir** : pour relier l'architecture stratigraphique des bassins sédimentaires aux forçages climatiques dans la perspective de mieux contraindre la distribution, les hétérogénéités et la qualité d'une roche-mère ou d'un réservoir [3] ;
- **l'analyse d'impact** : afin d'anticiper la réponse des paysages et des reliefs aux évènements climatiques, catastrophiques et extrêmes, avec une attention particulière sur la problématique de

l'érosion [4] ;

- **le domaine de l'environnement** : pour suivre et tracer des polluants, comme les plastiques et microplastiques, dans la perspective de définir des outils de surveillance environnementale et de proposer des solutions de remédiation [5, 6].

Sur ce dernier volet qui constitue un défi majeur pour nos sociétés, mon travail marque une avancée importante pour ce qui est d'**identifier et de caractériser les zones d'accumulation des microplastiques en vue d'y appliquer des solutions adaptées**. Les trois thèses que je co-encadre depuis s'inscrivent aussi pleinement dans cet axe de recherche crucial pour l'environnement.

[3] Evolution de la température du sous-sol dans le temps et dans l'espace
[4] C'est-à-dire la frise chronologique des évènements majeurs affectant les structures des bassins

Références :

1. Crombez V, Rohais S, Baudin F, Euzen T, Zonneveld JP, Power M, 2019. ***"3D stratigraphic architecture, sedimentary budget, and sources of the Lower and Middle Triassic strata of Western Canada: evidence for a major basin structural reorganization"***. Petroleum Geoscience, petgeo2019-024.
   >> https://doi.org/10.1144/petgeo2019-024

2. Rohais S, Lovecchio JP, Abreu V, Miguez M, Paulin S, 2021. ***"High-resolution sedimentary budget quantification – example from the Cenozoic deposits in the Pelotas basin, South Atlantic"***. Basin Res. 00:1-29.
   >> https://doi.org/10.1111/bre.12556

3. Rohais S, Hamon Y, Deschamps R, Beaumont V, Gasparrini M, Pillot D, Romero-Sarmiento MF, 2019. ***"Patterns of organic carbon enrichment in a lacustrine system across the K-T boundary: Insight from a multi-proxy analysis of the Yacoraite Formation, Salta rift basin, Argentina"***. International Journal of Coal Geology, Volume 210, ISSN 0166-5162,
   >> https://doi.org/10.1016/j.coal.2019.05.015

4. Chaboureau AC, Donnadieu Y, Sepulchre P, Robin C, Guillocheau F, Rohais S, 2012,***"The Aptian evaporites of the South Atlantic: a climatic paradox?"***, Climate of the past, Volume: 8 Issue: 3 Pages: 1047-1058,
   >> https://doi.org/10.5194/cp-8-1047-2012

5. Romero-Sarmiento M-F, Ravaleojaona H, Pillot D, Rohais S,***"Polymer quantification using the Rock-Eval® device for identification of plastics in sediments"***, Science of The Total Environment. Vol. 807, Part 3.
   >> https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.151068

6. Rohais S, Armitage JJ, Romero-Sarmiento M-F, Pierson, J-L, Teles V, Bauer D, Cassar C, Sebag D, Klopffer M-H, Pelerin M, 2024,***"A source-to-sink perspective of an anthropogenic marker: a first assessment of microplastics concentration, pathways, and accumulation across the environment"***, Earth Sci. Rev. 254, 104822.
   >> https://doi.org/10.1016/j.earscirev.2024.104822

Pour en savoir plus : Sébastien Rohais

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Connaissance et description des systèmes sédimentaires



Elodie Devers

Le cycle de vie des catalyseurs d'hydrotraitement : de la genèse de la phase active au recyclage des catalyseurs (HDR 2023)

Les catalyseurs sont des produits essentiels pour un grande nombre de procédés industriels et notamment pour **l'hydrotraitement des charges pétrolières ou biosourcées**. Leurs propriétés émanent des matériaux métalliques actifs qu'ils contiennent et dont la valeur et la criticité[1]justifient qu'on cherche à les récupérer sur les produits usagés. C'est pourquoi **l'économie circulaire des catalyseurs** est aujourd'hui un enjeu majeur pour le groupe IFPEN qui en produit des tonnages importants. Pour améliorer leur recyclage, il est essentiel de bien connaître **le cycle de vie de ces catalyseurs**, constitués de sulfures de métaux de transition supportés sur un oxyde poreux de type alumine (figure 1) et c'est ce sur quoi a porté mon HDR.
Les résultats présentés synthétisent une dizaine de thèses et post-doctorats que j'ai encadrés en collaboration avec des laboratoires académiques. D'un point de vue fondamental, ces travaux se sont tout d'abord attachés à acquérir **une meilleure compréhension du lien entre la genèse de ces matériaux et leurs performances catalytiques**, en s'appuyant sur des méthodes de synthèse innovante et de caractérisation avancée (ASAXS[2], imagerie XAS in situ[3]).

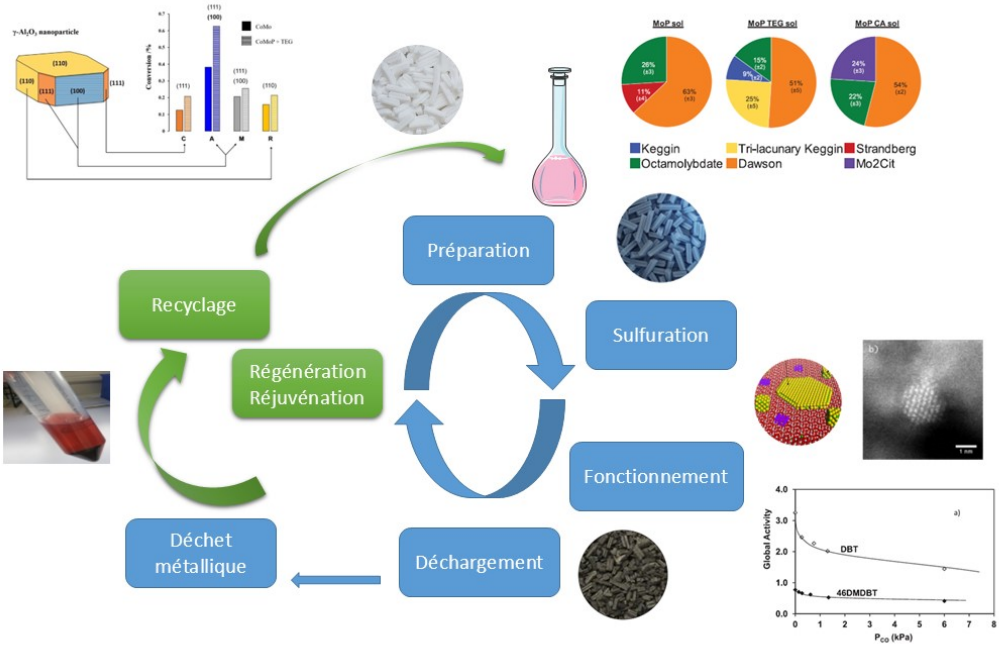


Figure 1 : Schéma du cycle de vie des catalyseurs de raffinage

[1] La plupart figurent sur la liste des matériaux critiques de l'Union Européenne
[2] Anomalous Small Angle X-Ray Scattering
[3] X-Ray Absorption Spectroscopy

Concernant **l'effet du support** (**alumines, oxyde de titane et silice**) des résultats inédits ont par exemple été obtenus quant à l'influence de la nature cristallographique de l'alumine, ce qui a conduit à proposer une approche originale dans le domaine de la science des surfaces. Ainsi, les effets d'orientation des faces de l'alumine sur les interactions avec la phase active, le taux de sulfuration, le taux de promotion de MoS_2 par le Co et in fine sur **les performances en HDS**[4] ont été mis en évidence en fonction de la présence de dopant, tels que le phosphore et/ou les additifs organiques [1]. L'étude de l'étape d'activation du catalyseur a révélé des différences quant au mécanisme de sulfuration selon qu'elle est réalisée en phase gaz, pratique courante au laboratoire, ou en phase liquide comme c'est pratiqué en raffinerie. Par ailleurs, grâce au couplage inédit de la spectroscopie Raman et du XAS, il a été possible pour la première fois de réaliser la spéciation des espèces molybdiques, d'une part en solution aqueuse, et d'autre part supportées à la surface d'une alumine. Ceci ouvre **de nouvelles perspectives dans la connaissance des précurseurs oxydes des catalyseurs et du lien avec leurs performances catalytiques** [2].
Enfin, **le fonctionnement opérationnel des catalyseurs** a été étudié et plus particulièrement **l'impact d'inhibiteurs sur leur désactivation et leur régénération**. Les inhibiteurs choisis pour cela ont été les composés oxygénés H_2O et CO, particulièrement représentatifs en tant que sous-produits des molécules oxygénées contenues en quantité dans les nouveaux flux issus de la biomasse, lesquels entrent aujourd'hui dans la raffinerie en co-processing [3]. Ces travaux ont mis en lumière les défis à relever pour répondre aux spécifications sur les produits raffinés tout en faisant face à des charges de plus en plus hétérogènes, en en particulier la recherche de nouveaux catalyseurs plus

performants et résistants.
L'ensemble de ces travaux permet de poser un socle solide de connaissances afin de proposer, pour le futur, des stratégies et filières de recyclage des catalyseurs.

[4] Hydrodésulfuration

Références :

1. R. Garcia de Castro, E. Devers, M. Digne, A.-F. Lamic-Humblot, G. D. Pirngruber, X. Carrier, ChemCatChem (2022) e202101493, Role of Phosphorus and Triethylene Glycol Incorporation on the Activity of Model Alumina-Supported CoMoS Hydrotreating Catalysts,
   >> doi.org/10.1002/cctc.202101493

2. C. Lesage, E. Devers, C. Legens, O. Roudenko, O. Delpoux, A. Beauvois, T. Putaud, V. Briois, ChemCatChem 2024, 0, e202401403, Speciation of the Oxide Phase of Molybdenum-Based HDS Catalysts Enhanced with Organic Additives Using an EXAFS/Raman Coupling Methodology,
   >> doi.org/10.1002/cctc.202401403

3. F. Pelardy, A. Daudin, E. Devers, C. Dupont, P. Raybaud, S. Brunet, Applied Catalysis B: Environmental 183 (2016) 317–327, Deep HDS of FCC gasoline over alumina supported CoMoS catalyst: Inhibiting effects of carbon monoxide and water,
   >> dx.doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.10.026F

A contacter : Elodie Devers

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Economie circulaire des catalyseurs



Laurent Cangémi

Contribution à l’étude des couplages dans les interfaces, les polymères et les milieux poreux (HDR 2023)

Les travaux de mon HDR relèvent du domaine de la modélisation et concernent **la formulation de couplages multiphysiques dans les matériaux**. Le point de départ de cette recherche est lié à une problématique d’endommagement sur un produit industriel : le phénomène de cavitation par décompression explosive de gaz dissous dans les polymères d’étanchéïté des conduites flexibles sous-marines. Par extension, il s’adresse aussi à tous **les milieux poreux** qui sont soumis à **des effets de transfert de masse, de chaleur, de plasticité ou d’endommagement**, comme les supports de catalyseur ou les milieux naturels du sous-sol.

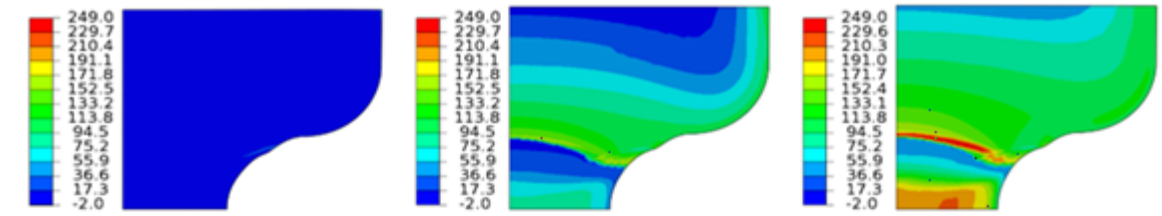
Dans ce cadre, certains couplages entre plasticité et endommagement ont également été abordés et ce, sous différents prismes : celui d’une approche bi-phasique viscoplastique et celui des zones cohésives[1].

La démarche générale que j’ai suivie a consisté à se placer dans le cadre théorique de **l’approche Thermodynamique des Processus Irréversibles** (TPI)[2] afin de déduire des lois de comportement couplées qui soient en accord avec les principes fondamentaux de la thermodynamique. Les résultats obtenus sont issus d’une forte collaboration avec des partenaires académiques[3].

Cette démarche a permis d’apporter un éclairage sur les processus de couplage existants entre **les transferts de masse** et **les phénomènes de déformation et d’endommagement des polymères semi-cristallins**[4] [1,2]. Plus spécifiquement, la nature mixte, à la fois Fickienne et Darcéenne, de ces transferts induit des efforts internes pouvant générer des phénomènes de cavitation localisés a priori contre-intuitifs (le matériau étant en compression). La Figure 1 illustre un exemple de simulation de cavitation obtenue dans un polymère PolyVynil-Di-Fluoré (PVDF) soumis à une forte pression externe d’eau.

Au-delà de cet exemple, le cadre théorique obtenu permet de proposer **une forme explicite pour une contrainte chimio-mécanique**, en introduisant **le potentiel chimique comme moteur principal des couplages**. Cette formulation peut, par exemple, être étendue à **la description de lois de sorption dans les milieux poreux nano-confinés** (comme les zéolites[5]) ou à **la croissance de dendrites dans les batteries à électrolytes solides**. Sur ce dernier thème, un travail est en cours pour adapter le formalisme du modèle à la présence de champs électriques et de phénomènes électrochimiques.

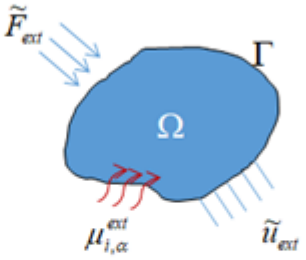
La démarche a été récemment utilisée pour développer de **nouvelles architectures de matériaux poreux par optimisation topologique** [3] et nous prévoyons de la déployer sur le cas des échangeurs à concentration solaire pour les procédés énergivores ou pour la production de carburants solaires (voir Figure 1). Un dernier cas d'application à venir concerne le design d'aimants optimisés afin augmenter l'efficacité des machines électriques.

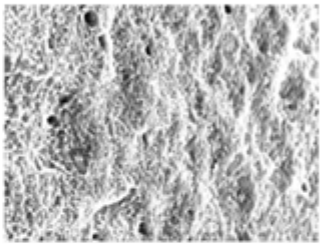


Localisation au cours du temps de la pression d'eau dans un PVDF soumis à une forte pression externe

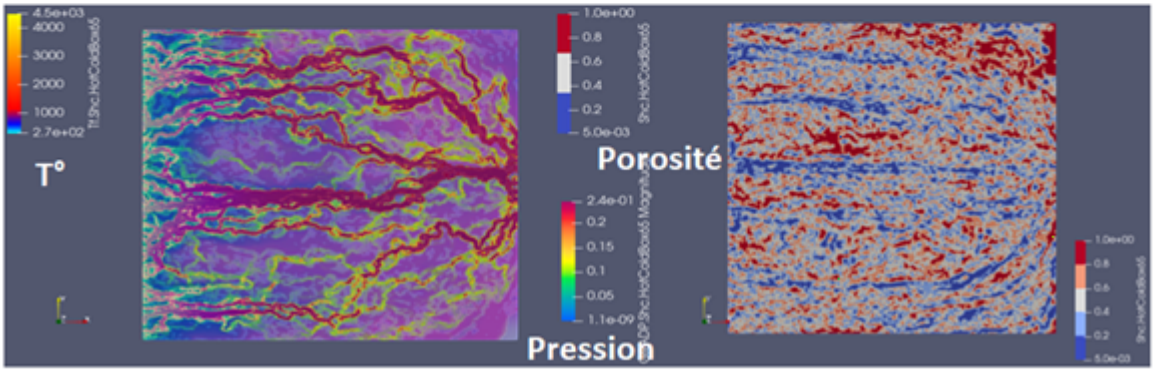
$$\begin{cases} \mathrm{div}(\tilde{\sigma}) = 0 \quad dans\ \Omega \\ \tilde{\sigma} = \tilde{A} : \tilde{\varepsilon} + \sum_i b_i Y_s^i \mu_s^i \quad dans\ \Omega \\ \tilde{\sigma}\,\tilde{n} = \tilde{F}_{ext} \ et\ \tilde{u} = \tilde{u}_{ext} \quad sur\ \Gamma \\ \mu_{i,\alpha} = \mu_{i,\alpha}^{ext} \quad sur\ \Gamma \end{cases}$$

Système d'équations chimio-mécanique





Cavitation dans un PVDF soumis une pression de fluide



Optimisation topologique hydro-convecto-radiative d'un échangeur solaire à haute T°

Figure 1. Exemples de retombées de l'approche couplée mécanique développée

[1] Le formalisme des zones cohésives permet de traiter le comportement mécanique des discontinuités d'interface entre deux milieux de propriétés différentes par le biais des sauts de déplacement
[2] Par opposition à la thermodynamique « classique » (transformations réversibles), le cadre permet de décrire les systèmes hors-équilibre qui évoluent par une suite d'états d'équilibre
[3] En particulier l'Institut P' et l'Université de Poitiers
[4] Aluminosilicates cristallins d'intérêt pour la fabrication des supports de catalyseurs

Références :

1. C. Baudet · J.-C. Grandidier · L. Cangémi (2011). ***A damage model for the blistering of polyvinylidene fluoride subjected to carbon dioxide decompression***. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 09/2011; 59(9):1909-1926
   >> https://doi.org/10.1016/j.jmps.2011.04.010

2. Castro-Lopez, C., ***"Modélisation du comportement diffuso-mécanique d'un polymère semi-cristallin sous pression d'eau"***. Thèse de l'Université de Poitiers, soutenue le 11 septembre 2015

3. G. O. Agyekum, L. Cangémi and François Jouve (2022). ***Homogenization based topology optimization of fluid-pressure loaded structures using the Biot–Darcy Model***. Optim Eng 25, 459–490 (2024)
   >> https://doi.org/10.1007/s11081-023-09811-1

A contacter : Laurent Cangémi

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Couplages multiphysiques en modélisation des matériaux



Senta Blanquet

La dégradation de la biomasse végétale par le cocktail enzymatique de Trichoderma reesei : composition, interactions et voies d'amélioration (HDR 2024)

Le développement d'énergies alternatives décarbonées est essentiel pour réduire les émissions de gaz à effet de serre et lutter contre le dérèglement climatique. C'est le cas notamment du **bioéthanol dit de deuxième génération**, produit à partir de résidus de biomasse lignocellulosique et utilisé comme carburant pour la mobilité.

Mes travaux de recherche, menés depuis de plus de 15 ans à IFPEN et résumés dans mon HDR, se sont focalisés sur une étape cruciale du procédé de production de ce biocarburant : **l'hydrolyse enzymatique**[1]. La dégradation de la biomasse y intervient grâce à l'utilisation d'**un cocktail complexe d'enzymes produit par le champignon filamenteux Trichoderma reesei**. Cependant, pour une utilisation industrielle, il est nécessaire de rendre ce cocktail plus efficace et c'est pourquoi j'ai étudié différents aspects concernant sa production, sa composition et son amélioration :

- Les conditions d'induction des gènes des cellulases[2];
- La régulation de la sécrétion de ces enzymes et l'identification des gènes cibles pour augmenter la capacité de sécrétion du champignon ;
- L'interaction des enzymes avec le substrat lignocellulosique à différents stades de l'hydrolyse ;
- Grâce à un modèle mathématique, l'identification pour un substrat donné d'enzymes limitantes (du fait de leur trop faible proportion dans le cocktail et/ou leur trop faible activité) et, pour l'hydrolyse de la paille de blé, la prédiction de la composition d'un cocktail maximisant le rendement ;
- **L'amélioration du cocktail** par complémentation avec **des enzymes provenant de la biodiversité microbienne** (voir figure).

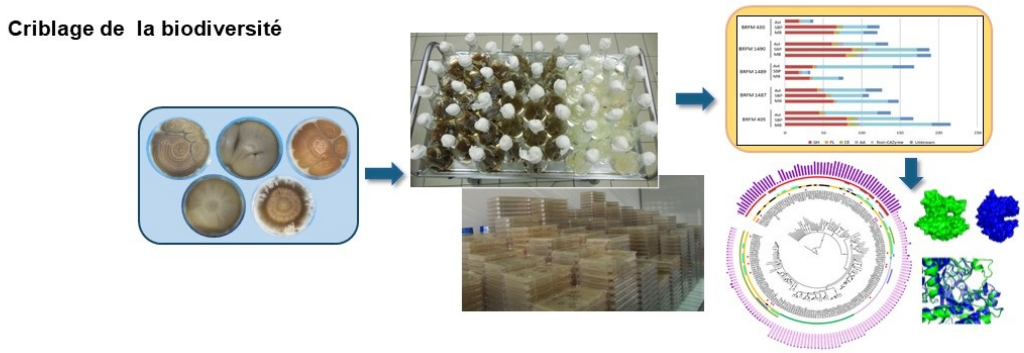
Concernant ce dernier point, les enzymes sécrétées (**le « sécrétome »**) par différents **champignons filamenteux**, tels que Podospora anserina ou Aspergillus japonicus, ont été analysées. A partir de sécrétomes apportant le plus de gain d'activité par ajout au cocktail de T. reesei, des enzymes potentiellement responsables de cette amélioration ont pu être identifiées à l'aide de la spectrométrie de masse. Dans l'un de ces sécrétomes, les AA16, une nouvelle famille d'enzymes capables de booster les cellulases, a été découverte et caractérisée [1].

D'autre part, j'ai exploré la biodiversité bactérienne dans une approche de métagénomique[3]. Un criblage fonctionnel d'une banque de gènes a tout d'abord résulté en l'identification d'une quarantaine

d’enzymes agissant sur la biomasse lignocellulosique. Quatre enzymes d’une famille d’endoglucanases ont ensuite été caractérisées et leur mode d’action sur la cellulose décrite [2].

[1] Dégradation d'un composé en présence d'enzymes suite à sa réaction avec l'eau
[2] Enzyme qui hydrolyse la cellulose
[3] Méthode d'étude du contenu génétique d'échantillons issus d'environnements complexes

L’ensemble de ces travaux a permis de dégager des pistes de progrès, par identification d’enzymes limitantes, ou encore de cibles d’amélioration du système de sécrétion chez T. reesei. J’ai pu ainsi démontrer le potentiel d’une exploration de la biodiversité pour la découverte de nouvelles enzymes efficaces et c’est dans cette voie que je poursuis actuellement mes recherches.



Workflow de criblage de la biodiversité : Les sécrétomes de champignons (photo du haut) ou les clones d’une banque métagénomique (photo du bas) sont testés pour leur activité sur un substrat représentatif. Les meilleurs échantillons sont soumis à une analyse plus poussée (biochimique, phylogénétique, modélisation de la structure, etc.)

Références :

1. Filiatrault-Chastel C, Navarro D, Haon M, Grisel S, Herpoël-Gimbert I, Chevret D, Fanuel M, Henrissat B, Heiss-Blanquet S, Margeot A, Berrin JG. AA16, a new lytic polysaccharide monooxygenase family identified in fungal secretomes.Biotechnol Biofuels. 2019; 12:55 >> https://doi.org/10.1186/s13068-019-1394-y

2. Aymé L, Hébert A, Henrissat B, Lombard V, Franche N, Perret S, Jourdier E, Heiss-Blanquet S. Characterization of three bacterial glycoside hydrolase family 9 endoglucanases with different modular architectures isolated from a compost metagenome. Biochim Biophys Acta Gen Subj. 2021; 1865(5):129848 >> https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2021.129848

A contacter : Senta Blanquet

>> NUMÉRO 57 DE SCIENCE@IFPEN

Conversion biochimique de la biomasse

Numéro 57 de Science@ifpen - spécial : Habilitation à diriger des recherches (HDR)
28 février 2025

Lien vers la page web :