



Rédigé le 30 septembre 2025



3 minutes de lecture



Actualités

Recherche fondamentale

Énergies renouvelables

Biocarburants et e-fuels

Analyse chimique

La stabilité des hydrocarbures face à l'oxydation est un paramètre critique dans le cadre de leur utilisation (comme carburants aéronautiques, lubrifiants, etc.), de leur stockage et de leur transport. Lorsqu'elle est insuffisante, des réactions indésirables peuvent altérer la performance des produits, réduire leur durée de vie et même poser des risques en termes de sécurité. Les méthodes expérimentales classiques pour caractériser cette stabilité, bien que robustes, se révèlent souvent coûteuses, longues et seules des conditions de test contraignantes et parfois difficiles à satisfaire complètement assurent leur validité.

Pour passer outre ces limitations, une étude récente a été menée par IFP Énergies nouvelles en partenariat avec l'Université de Lille, dans le but de développer un outil prédictif fiable évitant le recours systématique à des tests laborieux. Cette étude a reposé sur l'usage de l'apprentissage automatique (machine learning) à partir de données expérimentales à disposition.

Une approche combinée : expériences et apprentissage automatique

La démarche a d'abord requis la constitution d'une base de données issue de mesures expérimentales de stabilité à l'oxydation de divers hydrocarbures purs. Ces données ont été le socle de référence sur lequel des modèles de machine learning ont été entraînés.

Ces modèles exploitent des descripteurs moléculaires, c'est-à-dire des informations codant la structure chimique des composés, pour établir des relations entre la nature de l'hydrocarbure et sa résistance à l'oxydation. Une fois calibrés, ils deviennent alors capables de prédire la stabilité de molécules qui n'ont pas encore été testées en laboratoire.

Intérêts et perspectives

L'apport de cette approche est double. D'un côté, elle permet d'accélérer le processus de sélection de molécules en identifiant rapidement celles qui présentent une stabilité élevée, limitant ainsi les campagnes expérimentales coûteuses. De l'autre, elle ouvre la possibilité d'explorer un espace moléculaire beaucoup plus vaste que celui couvert par les données existantes. En proposant des prédictions pour des composés encore inédits, elle ouvre ainsi des pistes pour obtenir des molécules plus stables vis-à-vis de l'oxydation.

La convergence entre expérimentation et modélisation confère donc un avantage stratégique : le machine learning guide et enrichit en continu la recherche tandis que les essais en laboratoire se concentrent sur les molécules les plus prometteuses.

Conclusion

Cette étude démontre que l'apprentissage automatique peut jouer un rôle déterminant dans la compréhension et la prédiction de la stabilité à l'oxydation des hydrocarbures. Cet outil numérique est complémentaire aux mesures expérimentales, et permet de renforcer l'efficacité des travaux de recherche en guidant vers les voies les plus prometteuses. À terme, cette synergie pourrait contribuer à la conception de carburants et lubrifiants plus stables, adaptés à des exigences croissantes en matière de performance et de durabilité.

Référence :

A. Venegas-Reynoso, B. Creton, L. Giarracca-Mehl, M. Lacoue-Negre, C. Ruckebusch, L. Duponchel ***Oxidation Stability of Hydrocarbons: A Machine-Learning-Based Study***, Energy Fuels 2025, 39, 9, 4361–4373

>> DOI : <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.4c04926>

Contacts scientifiques : Marion Lacoue-Negre, Lucia Giarracca-Mehl, Benoît Creton

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR

[Prédiction de la stabilité à l'oxydation de fluides par apprentissage machine](#)

[L'apprentissage machine accélère l'accès par dynamique moléculaire ab initio à des données de haute précision pour la chimie](#)

[Accélération de calculs de cinétique chimique par méthodes d'apprentissage](#)

[Apport du machine learning à la stabilité à l'oxydation des hydrocarbures](#)

30 septembre 2025

Lien vers la page web :