

Rédigé le 01 décembre 2017

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Climat, environnement et économie circulaire | **Énergies renouvelables** | **Hydrogène** | **Hydrocarbures responsables** | **Carburants** | **Pétrochimie** | **Traitement de gaz** | **Risers et lignes de production**

Numéro spécial **Publications de jeunes docteurs**

En tant qu’acteur de la recherche et de la formation, IFPEN accueille chaque année une **quarantaine de nouveaux doctorants dans un cadre propice à l’innovation** . Ces étudiants ont ainsi l’opportunité de compléter leur formation scientifique par des travaux de recherche qui font progresser l’état de l’art dans les domaines qui intéressent la stratégie d’innovation d’IFPEN.

Dédié aux résultats de thèses soutenues récemment, ce numéro illustre la **diversité des champs disciplinaires couverts par les travaux de recherche d’IFPEN** ainsi que l’esprit créatif de nos jeunes chercheuses et chercheurs. Outre des résultats marquants allant de l’**amélioration de nos technologies pour l’offshore à la catalyse pour la transformation de la biomasse, en passant par l’expérimentation haut débit ou l’analyse des flux terrestres d’hydrogène naturel**, sont ici mis en exergue ceux de **Zlatko Solomenko, lauréat 2017 du prix Yves Chauvin.** Ce prix vient reconnaître, chaque année, l’excellence de travaux de thèse qui, en l’occurrence, ont été mis en œuvre en **mécanique des fluides, appliqués au traitement de gaz acides** et permettent d’envisager à terme une **meilleure captation du CO_2 émis par de grands complexes industriels.**

Bonne lecture,

Éric Heintzé, Directeur scientifique

Voir le PDF de la lettre

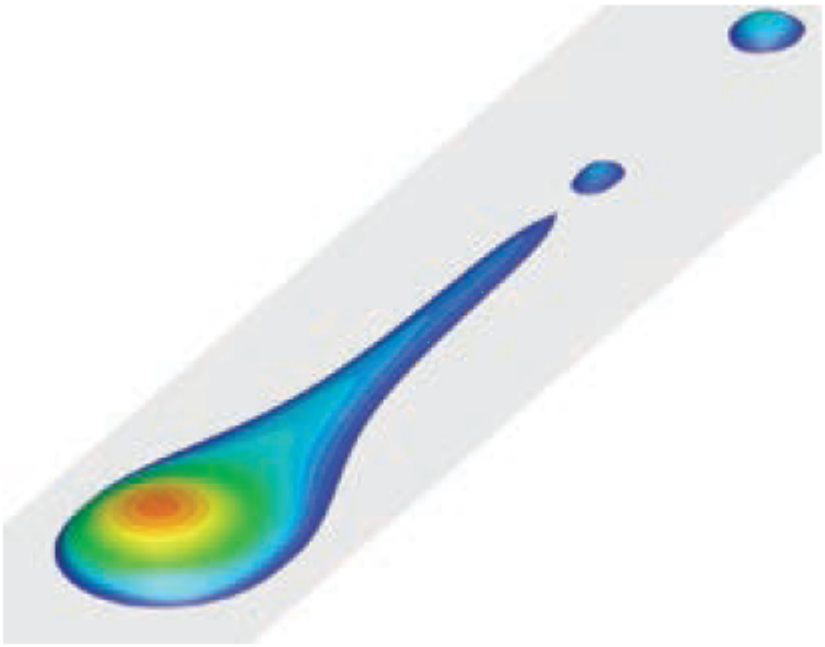
LES BRÈVES

THÈSE DE **ZLATKO SOLOMENKO*, PRIX YVES CHAUVIN 2017**

L'utilisation de **colonnes à garnissages structurés** est fréquente pour traiter les **gaz acides (CO_2 , H_2S)** contenus dans le gaz naturel. Elle devrait s'étendre à l'avenir au **traitement et à la valorisation des fumées de combustion** avec le développement de la filière **captage/utilisation/stockage du CO_2**. Les garnissages sont également utilisés dans les procédés de distillation, la production de gaz, ou encore de **purification du biogaz**.

Dans ces colonnes, la phase liquide chargée de capter les gaz indésirables s'écoule sur les plaques de garnissage, dont la géométrie complexe maximise la surface d'échange. Afin de concevoir des géométries optimisées, les **calculs d'hydrodynamique numérique** doivent reproduire les phénomènes de mouillage. Ceux-ci impactent les **écoulements de film liquide sur des surfaces complexes**, du fait de l'apparition de zones sèches, et donc de **« lignes de contact » (triphasiques)**, dont la dynamique est à prendre en compte. Une **méthodologie CFD (Computational Fluid Dynamics)** a été développée pour simuler ces écoulements liquides. Le mouillage étant dépendant de phénomènes à l'échelle nanométrique, et comme on ne peut résoudre numériquement les équations à cette échelle, il a été traité au travers d'un **angle de contact dynamique**, calculé à l'aide d'un **modèle sous-maille**(1). Les résultats ont été validés dans le cas d'une goutte glissante 3D (figure).

Des valeurs d'épaisseur de film et de vitesse interfaciale, obtenues au moyen de techniques spécialement mises au point, permettront de valider les calculs pour des plaques de garnissages structurés. Mesures et calculs seront ensuite reproduits sur un agencement de plusieurs plaques.



Simulation d'une goutte glissant sur un plan incliné menant à une instabilité capillaire

Cette **nouvelle méthodologie CFD** marque une étape clé dans le développement des **modèles prédictifs pour les écoulements** considérés. À terme, elle servira pour la conception de nouvelles géométries de garnissages, en vue d'améliorer les performances des contacteurs gaz/ liquide.

** Thèse intitulée **« Étude des écoulements diphasiques et du mouillage dans les garnissages structurés »***

(1) ***Z. Solomenko****, P. D.M. Spelt,* ***P. Alix****, J. Comput. Phys. 348 (2017) 151-170.*
> DOI: 10.1016/j.jcp.2017.07.011

Contact scientifique : Pascal Alix

> NUMÉRO 31 DE SCIENCE@IFPEN

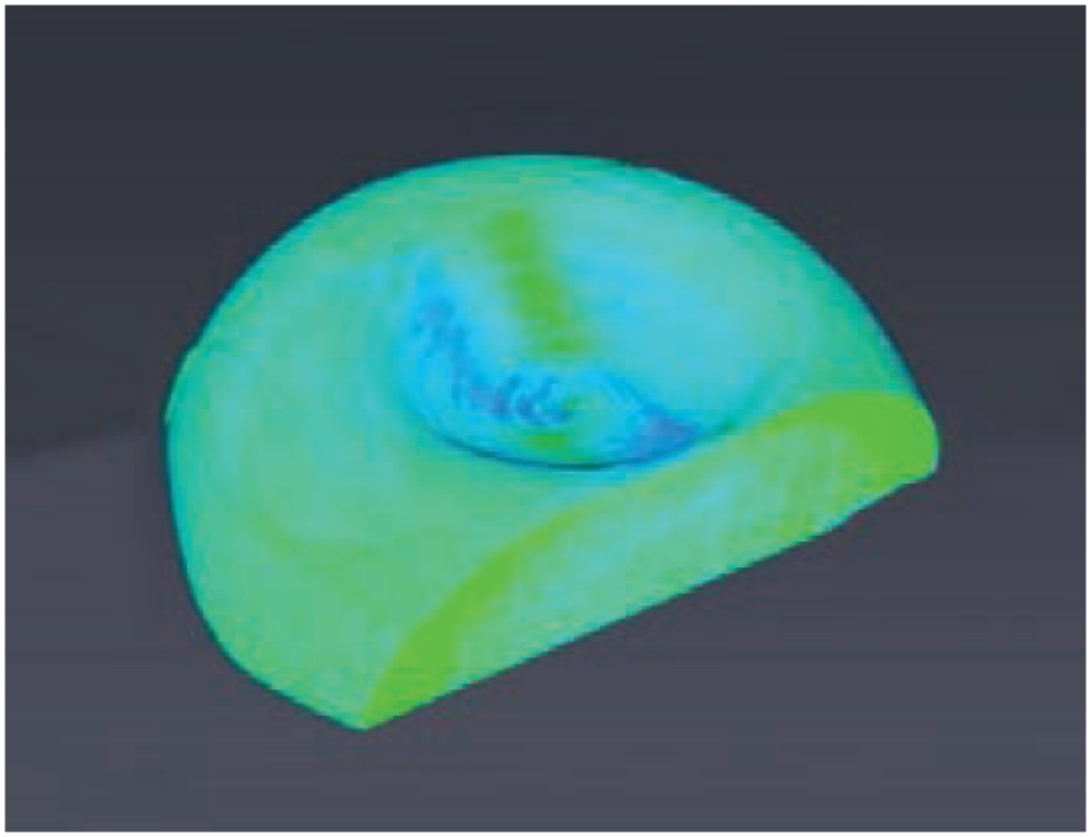
Un écoulement, ça mouille énormément ?

THÈSE DE **CHARLOTTE GALLOIS***

La production de **supports de catalyseurs en alumine** fait appel à une succession d'opérations unitaires[a] au cours desquelles la fraction solide du matériau varie, depuis l'état dispersé (fluide colloïdal) jusqu'à l'état solide poreux. Cette densification progressive se traduit par une évolution de l' **organisation structurale des particules solides à l'échelle mésoscopique**. Les agencements adoptés dépendent à la fois des propriétés physico-chimiques des suspensions initiales d'**alumine** et des procédés de densification employés.

L'identification et la compréhension des mécanismes à l'œuvre lors de la densification représentent un enjeu crucial car ils déterminent les propriétés des produits finis.

L'étude du **séchage d'un fluide colloïdal** a été étudiée en collaboration avec le laboratoire Phenix de l'UPMC. Une observation a été réalisée par microtomographie X rapide (sur une ligne synchrotron Paul Scherer Institute) sur une goutte de suspension d'alumine, déposée sur un **support solide hydrophobe**, et placée dans des conditions de séchage maîtrisées. Ces expériences ont montré qu'une goutte de suspension liquide s'effondre dans les étapes finales de son séchage, du fait de l'accumulation des particules sur la surface externe de la goutte (notamment au niveau de la ligne triple[b]), tandis qu'une goutte d'une suspension à l'état de gel se déforme de manière homothétique [(1-2)]. Ces travaux vont être mis à profit pour l'étude de formulations industrielles, et se poursuivre dans des conditions de séchage plus sévères.



Effondrement d'une goutte de suspension liquide (Ø = 1,48 mm) au cours de son séchage : visualisation de l'accumulation de solide (vert foncé) en périphérie.

Cette **nouvelle méthodologie CFD** marque une étape clé dans le développement des modèles prédictifs pour les écoulements considérés. À terme, elle servira pour la conception de **nouvelles géométries de garnissages**, en vue d'améliorer les performances des contacteurs gaz/ liquide.

a- Synthèse de la **boehmite**, filtration et lavage, mise en forme, calcination.

b- Interface solide-liquide-gaz.

Thèse intitulée **« Étude des propriétés physico-chimiques de suspensions de boehmite. Application aux supports catalytiques »*

(1) ***C. Gallois, E. Rosenberg, L. Barré, A. Bonnin, D. Frot, E. Lécolier, P. Levitz****, Drying of sessile droplets of anisotropic colloids dispersions, en cours de rédaction.*

(2) ***C. Gallois, D. Frot, E. Lécolier, P. Levitz****, Colloidal boehmite dispersions under osmotic stress: an in situ DLS investigation of gelation, en cours de rédaction.*

Contact scientifique : eric.lecolier@ifpen.fr

> NUMÉRO 31 DE SCIENCE@IFPEN

Voyage au centre de la goutte

THÈSE DE **JULIA GUÉLARD***

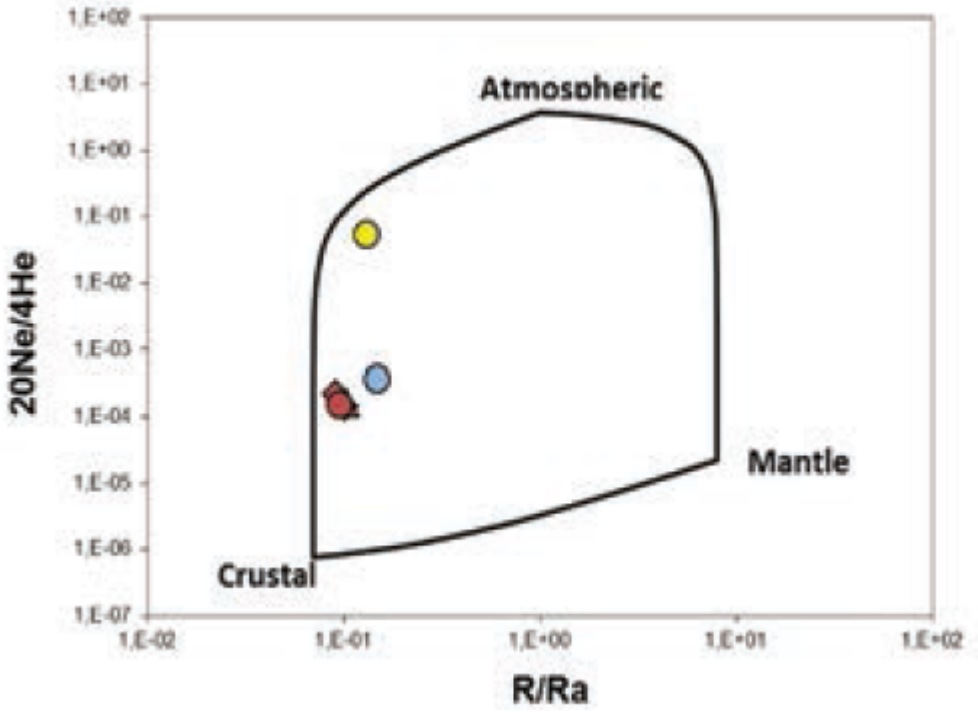
Dans les années 80, trois puits forés par un prospecteur indépendant, Don Clarke, ont révélé la **présence inattendue d'hydrogène moléculaire naturel (H_2)** dans le sous-sol du Kansas, au cœur du continent nord-américain.

D'autres sites continentaux ont depuis été identifiés, notamment au Mali et en Russie.

L'origine de la **présence d'hydrogène dans ces milieux intra-cratoniques**[a] restait cependant inexpliquée, même si des **réactions fluide/roche au niveau du socle géologique** étaient très fortement suspectées.

Un nouveau puits, foré en 2008, a fourni l'opportunité de résoudre la question, par l'étude des trois éléments du **système réactionnel supposé, roche/eau/gaz(**[1)]. Des **proportions variables de H_2 /CH_4/N_2**, ainsi que de l'**hélium** présent en quantité substantielle, ont été mesurées systématiquement sur le site.

L'analyse des gaz rares (figure) indique une origine **crustale**[b] de la production de H_2 dans le socle, tandis que les **isotopes stables de C et H** renseignent sur les **réactions de consommation/production entre H_2 et CH_4**, clés de l'évolution dynamique de leurs concentrations et pressions.



Origine des gaz selon l'analyse des gaz rares

L'oxydation du fer(II), largement présent dans les eaux de production, a été identifiée comme le **moteur de la production de H_2**. Celui-ci est fourni par les minéraux des roches du socle issues de

la **ceinture de roches vertes** (observées dans les forages alentour).

L'hydrogène naturel pourrait donc potentiellement se trouver sur tous les continents, dès lors que ces roches sont présentes.

Ce travail ayant permis d'identifier les ingrédients de la production de H_2, il reste aujourd'hui à savoir comment celui-ci s'est trouvé retenu dans les sédiments.

Les prochains travaux pourraient s'attacher à déterminer les paramètres physico-chimiques permettant la description prédictive du comportement de cet hydrogène naturel dans le sous-sol.

** Thèse intitulée :* ***Caractérisation des émanations de dihydrogène naturel en contexte intracratonique. Exemple d'une interaction gaz/eau/roche au Kansas.***

a *- Un craton désigne la portion stable d'un domaine continental.*
b *- Car issue de la croûte terrestre.*

(1) *-* ***J. Guélard****,* ***V. Beaumont****,* ***V. Rouchon****, F. Guyot,* ***D. Pillot****, D. Jézéquel, M. Ader, K. D. Newell, et* ***E. Deville*** *(2017), Natural H_2 in Kansas: Deep or shallow origin? - Geochem. Geophys. Geosyst., 18, 1841–1865.*
>> DOI: 10.1002/2016GC006544

Contact scientifique : julia.guelard@ifpen.fr

> NUMÉRO 31 DE SCIENCE@IFPEN

Hydrogène naturel en milieu continental : la question de l'origine résolue

THÈSE DE CHARLES BONNIN*

Une étape essentielle du **développement des matériaux catalytiques** est l'évaluation de leurs performances, généralement réalisée au laboratoire sur des équipements spécifiques. Pour les catalyseurs destinés à une **application slurry**[a], on opère dans des **réacteurs triphasiques (gaz-liquide-solide)** agités, miniaturisés et alimentés en continu. Ceux-ci sont complexes à opérer et imposent des tests longs (parfois sur plusieurs semaines) pour accéder à des données telles que la **sélectivité du catalyseur**. Cette difficulté expérimentale, au demeurant coûteuse, est un frein à la mise au point de nouveaux matériaux.

Dans ce contexte, l'**expérimentation haut débit (EHD) en milli lit fixe** est une méthode de screening qui offre trois avantages : la comparaison directe des performances de plusieurs catalyseurs dans des conditions identiques, la mise en œuvre de faibles quantités de matière, et des temps de test courts. Cependant, les conditions propres à l'EHD nécessitent de reconsidérer les modèles physiques utilisés pour l'exploitation des résultats, et, en particulier, pour déterminer l'activité du catalyseur à partir de la mesure du taux de conversion.

Les travaux ont ainsi porté, d'une part, sur la compréhension de la physique au sein des réacteurs EHD[(1-2)], puis son intégration dans un modèle numérique et, d'autre part, sur une série d'expérimentations avec les deux types d'équipement. Le modèle développé, qui couple des aspects hydrodynamiques et réactionnels, permet d'accéder directement à l'activité des catalyseurs et de retrouver le même classement de performance sur les deux types de réacteur, validant ainsi la nouvelle méthodologie EHD.

Le gain de temps résultant pour le développement des catalyseurs est un atout important pour l'exploration de **formulations plus en rupture.**



Chargement des réacteurs sur un équipement EHD.

Cette **nouvelle méthodologie CFD** marque une étape clé dans le développement des **modèles prédictifs** pour les écoulements considérés. À terme, elle servira pour la conception de **nouvelles géométries de garnissages**, en vue d'améliorer les performances des contacteurs gaz/ liquide.

[a] - Suspension de catalyseur de taille micrométrique dans une phase liquide

---

*Thèse intitulée ***« Évaluation de l'expérimentation haut débit en milli lit fixe pour le screening de catalyseurs Fischer-Tropsch. »***

(1) **C. Bonnin, L. Brunet-Errard, D. Decottignies**, V. Ordomsky, A. Khodakov, International conferences on Microreaction Technology, Beijing, 2016

(2) **C. Bonnin, L. Brunet-Errard, D. Decottignies, E. Rosenberg,** V. Ordomsky, A. Khodakov, « Microfl uidics: from laboratory tools to process development », Rueil-Malmaison, France, novembre 2015

Contact scientifique : charles.bonnin@ifpen.fr

> NUMÉRO 31 DE SCIENCE@IFPEN

L'EHD en milli lit fixe « booste » le développement des catalyseurs slurry

THÈSE DE MARIE GUEHL*

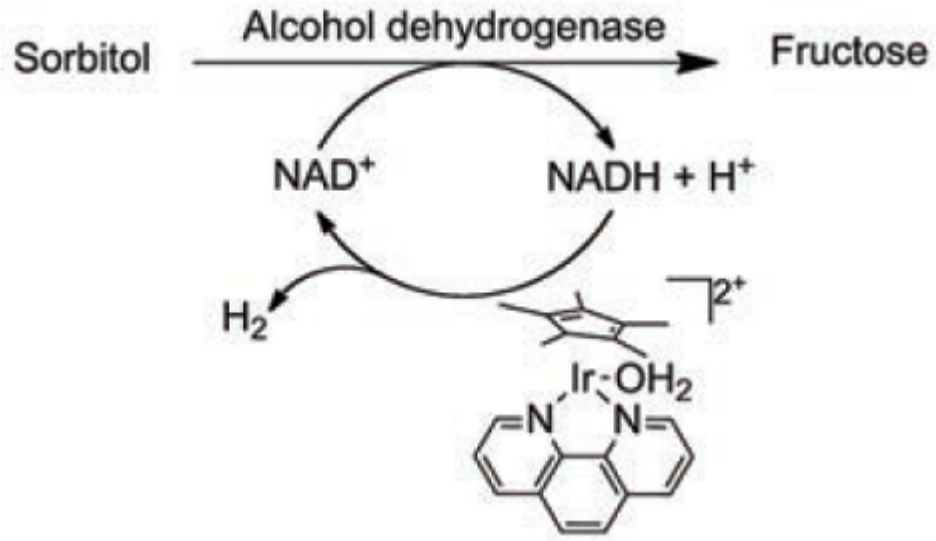
La transition écologique nécessite de développer de **nouvelles filières industrielles valorisant des ressources renouvelables**. C'est le cas des **sucres issus de la biomasse lignocellulosique**, pour la production de molécules à haute valeur ajoutée. Exploiter cette ressource riche et dotée de multiples fonctions chimiques implique d'imaginer des concepts catalytiques en rupture avec les procédés destinés aux hydrocarbures.

La **catalyse biologique**, notamment enzymatique, est particulièrement appropriée pour convertir les sucres de la biomasse, avec une très grande sélectivité, en milieu aqueux. Elle présente néanmoins plusieurs difficultés, dont la nécessité d'**associer à l'enzyme un cofacteur[a] coûteux** à produire et à régénérer par le biais d'une seconde étape enzymatique.

Une voie originale a été suivie pour lever ce verrou : la **catalyse hybride**, associant la sélectivité des enzymes et la robustesse des catalyseurs chimiques. Cette combinaison exploite les atouts respectifs des deux types de catalyse pour produire des **« molécules plateformes »**, difficiles à obtenir autrement, de façon hautement sélective(1).

Ainsi, IFPEN a collaboré avec l'UCCS[b] Université Lille I pour la **transformation de sorbitol en fructose**, un **synthon** de choix dans l'obtention de produits de haute valeur ajoutée. Ces travaux ont démontré la compatibilité entre une **enzyme alcool déshydrogénase (ADH) et un catalyseur chimique organométallique**, capable de régénérer le cofacteur in situ (figure). Les travaux ont porté sur la cohabition des catalyses enzymatique et chimique et sur l'identification des conditions de fonctionnement optimales du système global(2).

Cette première preuve de concept ouvre de nouvelles perspectives pour les procédés de valorisation de la biomasse.



Catalyse hybride appliquée à la transformation enzymatique du sorbitol en fructose avec la régénération du cofacteur nicotinamide.

[a] - Composé chimique non protéique mais qui est nécessaire à l'activité biologique d'une protéine.

[b] - Unité de catalyse et chimie du solide.

---

*Thèse intitulée ***« Nouveau concept de catalyse hybride pour la transformation de la biomasse »***

(1) A. Gimbernat, **M. Guehl**, M. Capron, **N. Lopes Ferreira**, R. Froidevaux, J-S. Girardon, P. Dhulster, **D. Delcroix**, F. Dumeignil, ChemCatChem, 2017, 9, 2080-2084.

(2) Brevet FR3031983(A1)

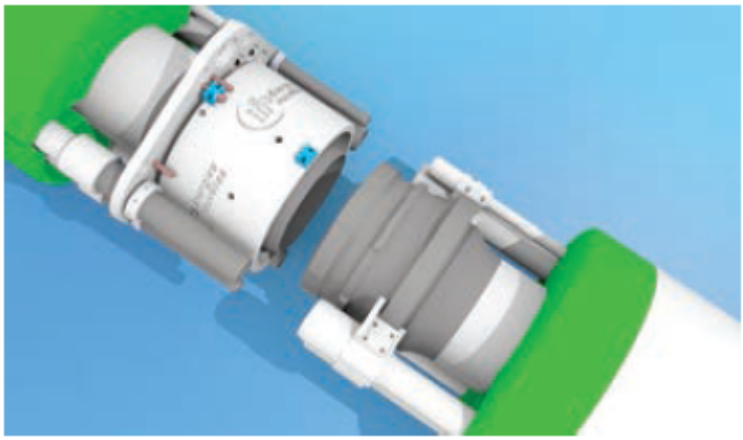
Contacts scientifiques : damien.delcroix@ifpen.fr - nicolas.lopes-ferreira@ifpen.fr

> NUMÉRO 31 DE SCIENCE@IFPEN

La catalyse hybride peut s’alimenter en biosourcé

THÈSE DE VIDIT GAUR*

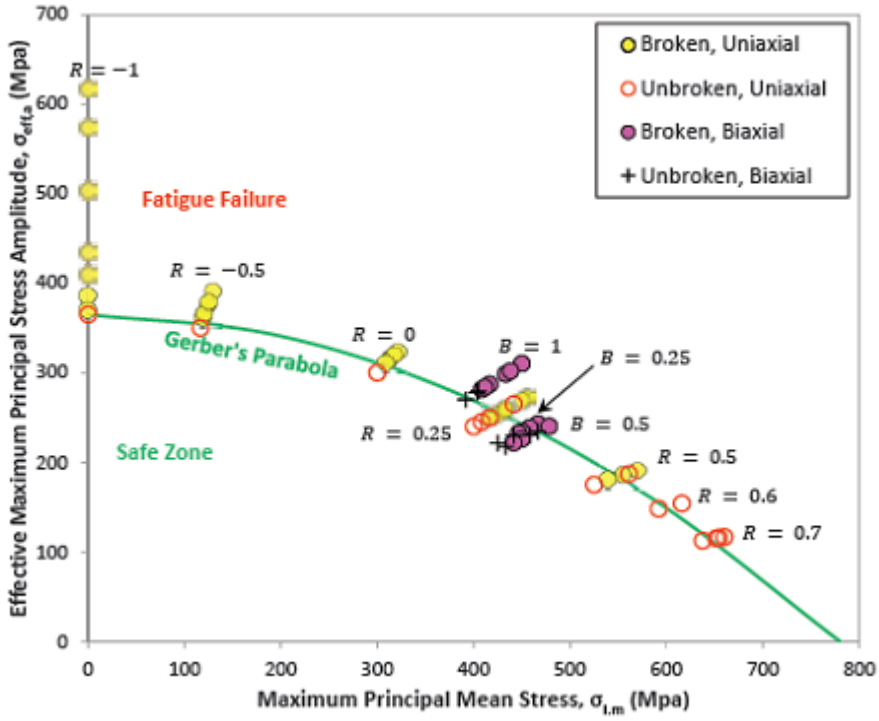
Le **i-Clip-Riser®** est un produit technologique développé par IFPEN, qui permet une **connection rapide d'éléments de riser de forage**[a] **offshore**. Du fait du poids de l'ensemble et des mouvements de la houle, il subit constamment des sollicitations en fatigue. Une analyse détaillée de ces dernières, s'appuyant sur des **simulations numériques non linéaires**, a mis en évidence leur **caractère cyclique multiaxial** que les critères de fatigue classiques, décrits dans la littérature, ne parviennent pas à retranscrire.



Une campagne expérimentale très complète sur éprouvettes — **essais mécaniques multiaxiaux dynamiques, observations MEB et MET**[b] **, diffraction aux rayons X** — a mis en évidence différents **mécanismes d'amorçage de fissure**, suivant les conditions de sollicitation. Par ailleurs, elle a permis de quantifier l'impact de plusieurs paramètres dimensionnants tels que : la **contrainte moyenne de sollicitation, le rapport de biaxialité des contraintes ou encore la présence de l'environnement salin**(1).

Un **critère d'endurance limite en fatigue**, comportant seulement deux paramètres matériaux, a été déduit de cet important programme d'essai, et a été validé dans toutes les conditions testées(2). Basé sur l'**approche de Gerber**[c] , il permet de caractériser la tenue du connecteur sous les **chargements multiaxiaux** rencontrés en service. Aisément utilisable pour le calcul de structure, il rend possible une validation plus réaliste du comportement en fatigue du i-Clip-Riser®.

L'extension de ces travaux à un critère de durée de vie est envisagée, de même que des essais de validation sur prototype (échelle 1:1).



Comparaison du critère proposé (en vert) et des différents essais réalisés (symbole) dans le plan des contraintes effectives, en fonction de la contrainte maximum principale.

a *- Faisceau de tubes, dont une conduite principale, reliant la plateforme de forage et la tête de puits sous-marine.*
b *- Microscopie électronique à balayage et en transmission.*
c *- Approche qui permet de rendre compte de l'effet de contrainte moyenne sur l'endurance limite en tension uniaxiale.*

---

* *Thèse intitulée* ***"Fatigue and corrosion fatigue in Cr-Mo steel in biaxal tension"***

(1) **V. Gaur**, V. Doquet, **E. Persent**, C. Mareau, **E. Roguet, J. Kittel**, Surface versus internal fatigue crack initiation in steel: Influence of mean stress, International Journal of Fatigue, 2016, 82-3, 437-448.
>> DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2015.08.028

(2) **V. Gaur**, V. Doquet, **E. Persent, E. Roguet**, Effect of biaxial cyclic tension on the fatigue life and damage mechanisms of Cr–Mo steel, Int. Journal of Fatigue, 2016, 87, 124-131.
>> DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2016.01.021

Contact scientifique : eleonore.roguet@ifpen.fr

> NUMÉRO 31 DE SCIENCE@IFPEN

Même fatigué, le i-Clip-Riser® tient le coup !

Numéro 31 de Science@ifpen - Publications de jeunes chercheurs
01 décembre 2017

Lien vers la page web :