Rédigé le 07 décembre 2018 15 minutes de lecture
Actualités

- Recherche fondamentale

- Géosciences
- Sciences chimiques
- Biosciences et biotechnologies
- Sciences de l'ingénieur
- Mathématiques et informatique

Numéro spécial **Publications de jeunes docteurs**

La recherche fondamentale à IFPEN, structurée autour de **questionnements scientifiques transverses et pluridisciplinaires**, vise à construire les socles de connaissances nécessaires au développement de solutions nouvelles dans les domaines de l'**énergie, du transport et du climat**. La contribution des doctorants est une composante essentielle de cette recherche et illustre notre collaboration fructueuse avec la recherche académique, en France et à l'international.

IFPEN accueille annuellement une quarantaine de doctorants qui vont se former à la recherche en mettant leurs compétences et leur enthousiasme au service de défis scientifiques majeurs, accompagnés de perspectives applicatives concrètes.

Chaque année, le Conseil scientifique d'IFPEN décerne le **prix Yves Chauvin** à la meilleure thèse soutenue. En rassemblant les présentations synthétiques des travaux qui y ont candidaté, ce numéro spécial met en évidence la richesse des thématiques et des champs disciplinaires ainsi couverts. Cette année, le prix a été attribué à **Aurélie Pirayre**, pour sa thèse en **bio-informatique**, emblématique de la capacité de ces jeunes chercheurs à créer des ponts créatifs entre les domaines.

Bonne lecture.

Benjamin Herzhaft, Responsable de programme recherche fondamentale à la Direction scientifique

---

Voir le PDF de la lettre

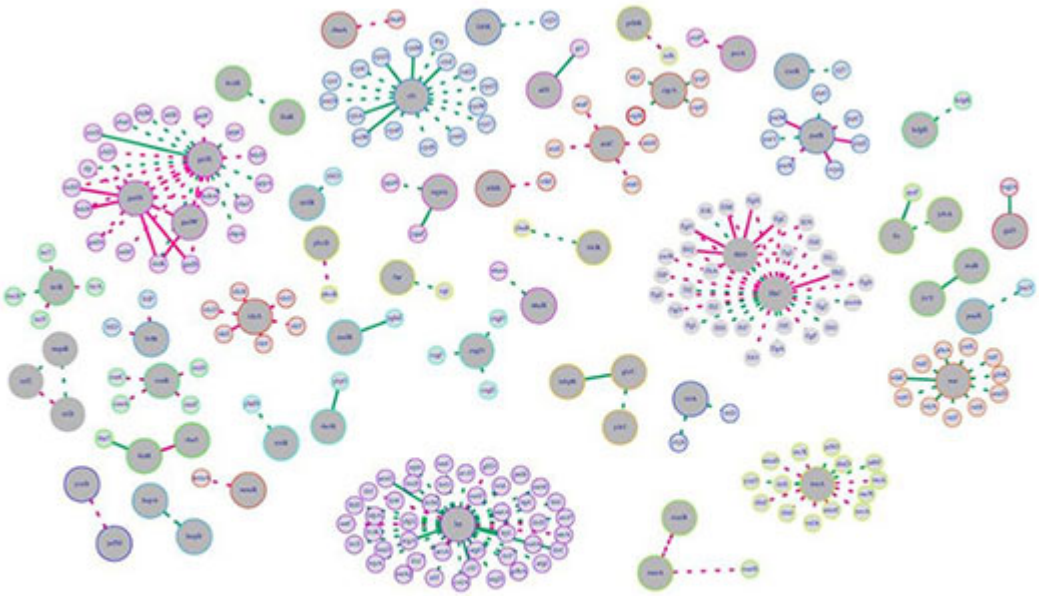
Thèse d'Aurélie Pirayre*, prix Yves Chauvin 2018

***Trichoderma reesei* est un champignon étudié à IFPEN pour sa production d'enzymes utilisées comme catalyseurs dans les procédés de production de biocarburants de 2e génération**[a].

Une compréhension plus fine du fonctionnement de ces gènes étant nécessaire pour tenter d'améliorer l'efficacité de tels procédés, **cette thèse visait à révéler la manière dont interagissent ceux qui sont, directement ou non, liés à la production d'enzymes**.

Le volume considérable et la forte hétérogénéité des données biologiques à analyser pour ce type de recherche ont requis le développement d'algorithmes bio-informatiques[b] performants. **Une suite d'outils d'optimisation, intégrant des contraintes biologiques et structurelles, a été développée pour élaborer des graphes d'interactions entre gènes**.

Articulée autour de BRANE[c], cette suite comprend :
- **BRANE Cut**(1), méthode dédiée aux réseaux de régulation (figure),
- et **BRANE Clust**(2), groupant les gènes selon leurs fonctions biologiques.



Réseau de gènes du micro-organisme modèle Escherichia coli obtenu avec BRANE Cut(1).

L'amélioration, par rapport aux méthodes de référence publiées, a été démontrée, *via* des données établies[d], sur des micro-organismes modèles.

Ainsi validée, **BRANE a été employée sur *Trichoderma reesei*, avec une sélection méticuleuse et prometteuse de gènes candidats**.

L'aide précieuse apportée par ces nouveaux outils pour identifier rapidement des cascades d'interactions utiles à la production d'enzymes, invite à en étendre le périmètre d'action. Cela passe par l'alliance de nouvelles données « omiques » et de mécanismes épigénétiques, élargie à la parentèle de notre champignon.

a- *N'employant que les parties non comestibles des plantes.*

b- *Utilisant la puissance de stockage et d'analyse de l'informatique pour étudier des disciplines des sciences du vivant.*

c- ***Biologically-Related Apriori Network Enhancement****.*

d- *À la fois réelles et simulées, mises à disposition par le* ***consortium DREAM***
>> http://dreamchallenges.org

** Thèse intitulée "**Reconstruction and Clustering with Graph optimization and Priors on Gene networks and Images**"*

(1) ***A. Pirayre, C. Couprie, F. Bidard, L. Duval****, J-C. Pesquet. BRANE Cut: biologically-related a priori network enhancement with graph cuts for gene regulatory network inference, BMC Bioinformatics, 2015.*
>> DOI: 10.1186/s12859-015-0754-2

(2) ***A. Pirayre, C. Couprie, L. Duval****, J-C. Pesquet. BRANE Clust: Cluster-Assisted Gene Regulatory Network Inference Refinement, IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, 2018, Vol. 15, Issue 3.*
>> DOI: 10.1109/TCBB.2017.2688355

Contacts scientifiques : **aurelie.pirayre@ifpen.fr** - **laurent.duval@ifpen.fr**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

''BRANE Power'' : gènes et algorithmes, une alliance pour la chimie verte

Thèse de Pauline Simonnin*

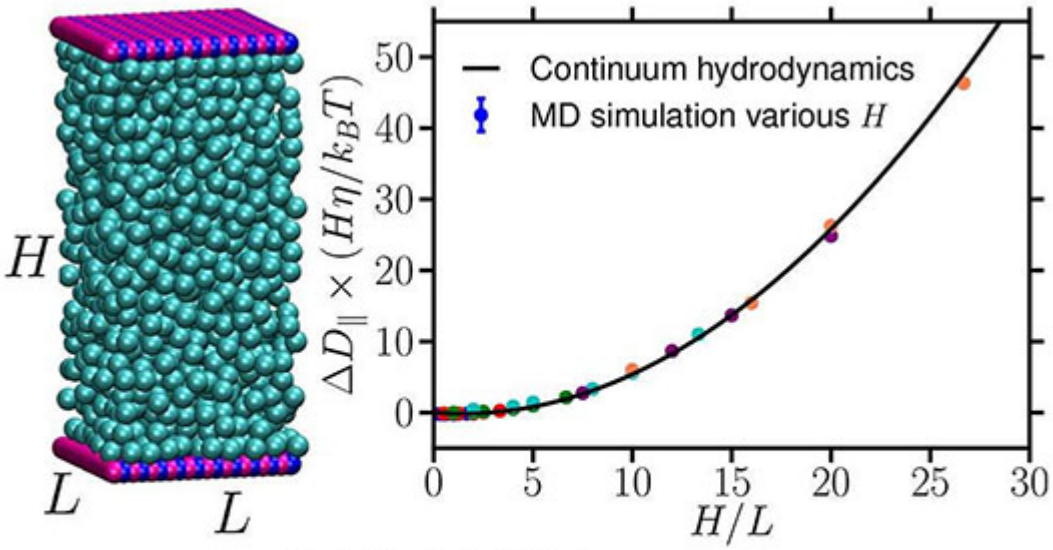
Comprendre et modéliser les processus de transport dans les milieux fortement confinés est un enjeu important pour innover dans des champs d'applications très diversifiés de la recherche menée à IFPEN :

- **conception des catalyseurs**,
- **stockage ou génération d'électricité**,
- **solutions d'étanchéité pour le stockage géologique**.

Dans ce dernier cas, **le recours à la dynamique moléculaire** a permis de simuler le **processus de diffusion de molécules d'eau ou de gaz dans des nanopores d'argile**.

Ce travail a bénéficié **des ressources intensives de calcul fournies par le Genci**[a].

Au cours de la simulation, **on a pu mettre en évidence une dépendance forte des coefficients de diffusion obtenus vis-à-vis de la taille et de la forme de la boîte de simulation** (figure). Cet artefact est dû aux interactions hydrodynamiques imposées de fait, numériquement, par les conditions aux limites périodiques. Un calcul analytique complexe a permis de le quantifier et de le corriger à l'aide d'une formule explicite[(1)].



Coefficient de diffusion apparent en fonction de la forme de la boîte de simulation : excellent accord entre la formule analytique (trait plein) et les simulations pour différents couples (H, L).

L'étude de la diffusion aux interfaces des argiles a mis en évidence l'effet des espèces ioniques, toujours présentes dans le fluide, sur la structure et sur les propriétés hydrodynamiques de ces interfaces[(2)]. **Sa prise en compte permet de gagner en réalisme et en prédictivité** pour les calculs visant à reproduire le phénomène de diffusion.

Ce travail a démontré l'apport des outils de dynamique moléculaire à l'obtention de prédictions quantitatives de propriétés servant à la simulation des processus de transport dans les milieux nanoporeux. **L'injection de ces résultats dans des modèles de transport à plus grande échelle offre des perspectives particulièrement intéressantes dans différents secteurs de l'énergie, de la chimie ou de l'environnement**.

a - *Grand équipement national de calcul intensif.*

** Thèse intitulée* ***« Transport de fluides dans des nanopores : des modèles moléculaires aux modèles continus »***.

(1) ***P. Simonnin, B. Noetinger, C. Nieto-Draghi**, V. Marry & B. Rotenberg. Diffusion under Confinement: Hydrodynamic Finite-Size Effects in Simulation, J. Chem. Theory Comput., 2017, 13 (6), pp 2881–2889*
>> DOI : 10.1021/acs.jctc.7b00342

(2) ***P. Simonnin, B. Noetinger, C. Nieto-Draghi**, V. Marry & B. Rotenberg. (2018). Mineral- and Ion-Specific Effects at Clay–Water Interfaces: Structure, Diffusion, and Hydrodynamics, J. Phys. Chem. C, 2018, 122 (32), pp 18484–18492*
>> DOI : 10.1021/acs.jpcc.8b04259

Contact scientifique : **Benoit Noetinger**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

Mieux simuler les processus de transport dans des nanopores grâce à la dynamique moléculaire

Thèse de Leonor Catita*

Dans le but d'obtenir des carburants plus propres, les procédés d'hydrotraitement (HDT) **nécessitent de nouveaux catalyseurs plus actifs et plus sélectifs**.

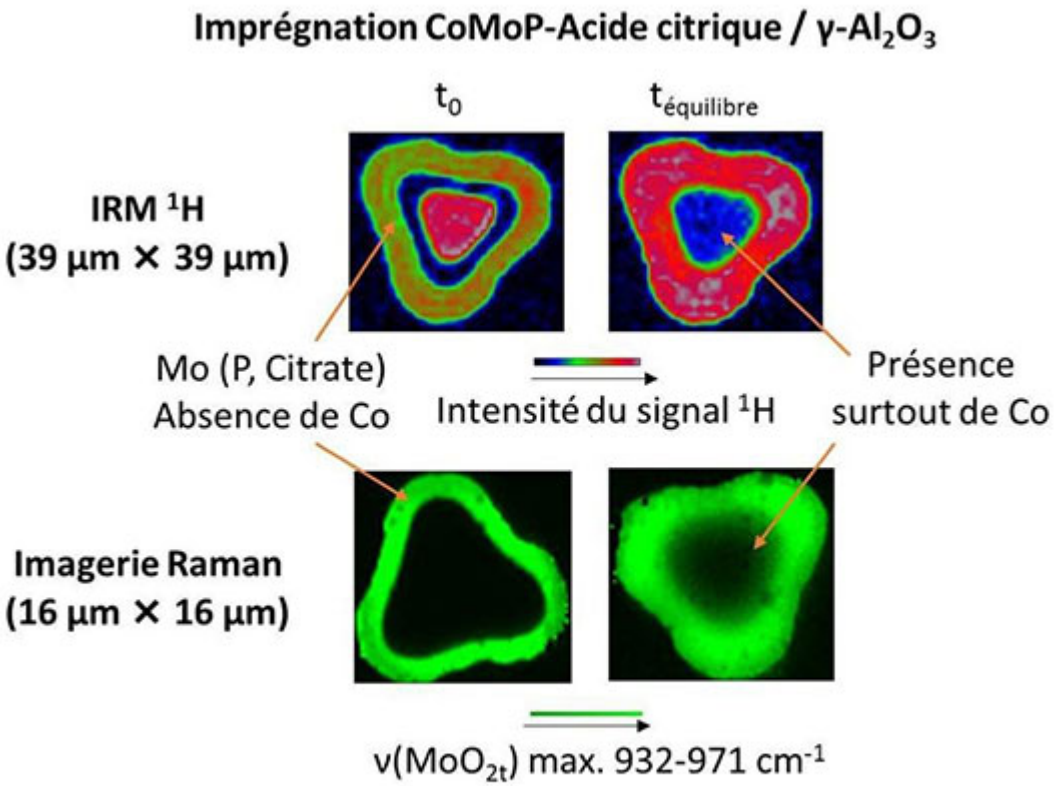
Ceci réclame une meilleure compréhension d'une étape clé de la préparation des catalyseurs : l'imprégnation du support par une solution aqueuse ou organique des précurseurs métalliques, futurs sites actifs en catalyse.

Dans ce travail, **une méthodologie analytique basée sur les techniques d'IRM[a] et Raman[b] a été développée pour caractériser l'étape d'imprégnation**.

L'**objectif** est de **pouvoir décrire les phénomènes physiques et chimiques impliqués lors du transport du précurseur métallique au sein de la porosité du support**.

Dans cette étude, l'IRM a été employée afin de **suivre**, pour la première fois *in situ* sur des systèmes réels comme les catalyseurs d'HDT, **l'étape d'imprégnation avec une solution aqueuse complexe[c]**, **en présence ou non d'acide citrique**(1).

Grâce à l'imagerie Raman, **nous avons pu confirmer l'identification de la nature chimique** des espèces de molybdène déposées sur le support. Nous avons **ainsi mis en évidence :**
- une affinité préférentielle entre l'acide citrique et la surface de l'alumine ? (figure),
- de même qu'un impact fort du pH local,
- et de la présence de phosphore sur la nature des espèces déposées(2).



Effet de la présence d'acide citrique dans les catalyseurs d'HDT (CoMoP/γ-Al_2O_3).

Ces résultats ont servi de base à l'élaboration d'un modèle mathématique destiné à rationaliser **l'étape d'imprégnation de catalyseurs monométalliques**. Celui-ci **permet d'estimer**, pour une solution donnée, **le temps d'imprégnation** au sein de nouveaux supports **et d'évaluer l'accessibilité de la phase active**.
La méthode développée peut s'appliquer à de nombreux autres systèmes catalytiques, pour en accroître l'efficacité grâce à une meilleure distribution de la phase active.

a- *Imagerie par RMN (Résonance magnétique nucléaire).*

b- *Méthode spectroscopique renseignant sur la structure chimique et les composés présents.*

c- *Composée de molybdène (Mo), de cobalt (Co) et de phosphore (P).*

** Thèse intitulée* ***« Contribution of NMR and Raman imaging for modeling and rationalization of the impregnation process of metallic precursors in porous media ».***

(1) ***L. Catita, A-A. Quoineaud, D. Espinat, C. Pichon, O. Delpoux****, Application of Magnetic Resonance Imaging and Raman Imaging to study the impact of phosphorus in impregnation of hydrotreatment catalysts , Applied Catalysis A:General Vol. 547 (2017), 164-175*
>> DOI: 10.1016/j.apcata.2017.08.039

(2) ***L. Catita, A-A. Quoineaud, M. Moreaud, D. Espinat, C. Pichon, O. Delpoux***, *Impact of Citric Acid on the Impregnation of CoMoP/?-Al2O3 Catalysts: Time and Spatially Resolved MRI and Raman Imaging Study, Topics in Catalysis, Sept. 2018, Volume 61, Issue 14, pp 1474–1484*
>> DOI: 10.1007/s11244-018-1038-7

Contact scientifique : **leonor.duarte-mendes-catita@ifpen.fr**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

Imageries RMN et Raman : l'imprégnation des catalyseurs comme si vous y étiez

Thèse d'Alexandre Lettéron*

Décrypter les changements environnementaux et leurs impacts sur les écosystèmesest l'**un des défis importants auxquels doivent faire face nos sociétés modernes**.

À cet égard, **en raison des fluctuations de leur niveau et des variations écologiques très rapides**[a], **les systèmes sédimentaires lacustres constituent des enregistrements particulièrement complets et fins de l'évolution des paramètres environnementaux**(figure) et ce, sur des durées d'ordre géologique.

Cependant, une problématique concerne l'identification et la hiérarchisation de ces paramètres en termes d'impact, afin de **bâtir des modèles prédictifs**.

Ces modèles permettront de **quantifier l'évolution des systèmes lacustres**, en termes :
- d'hydrologie,
- d'écologie,
- et de géochimie des eaux (salinité, alcalinité, etc.).

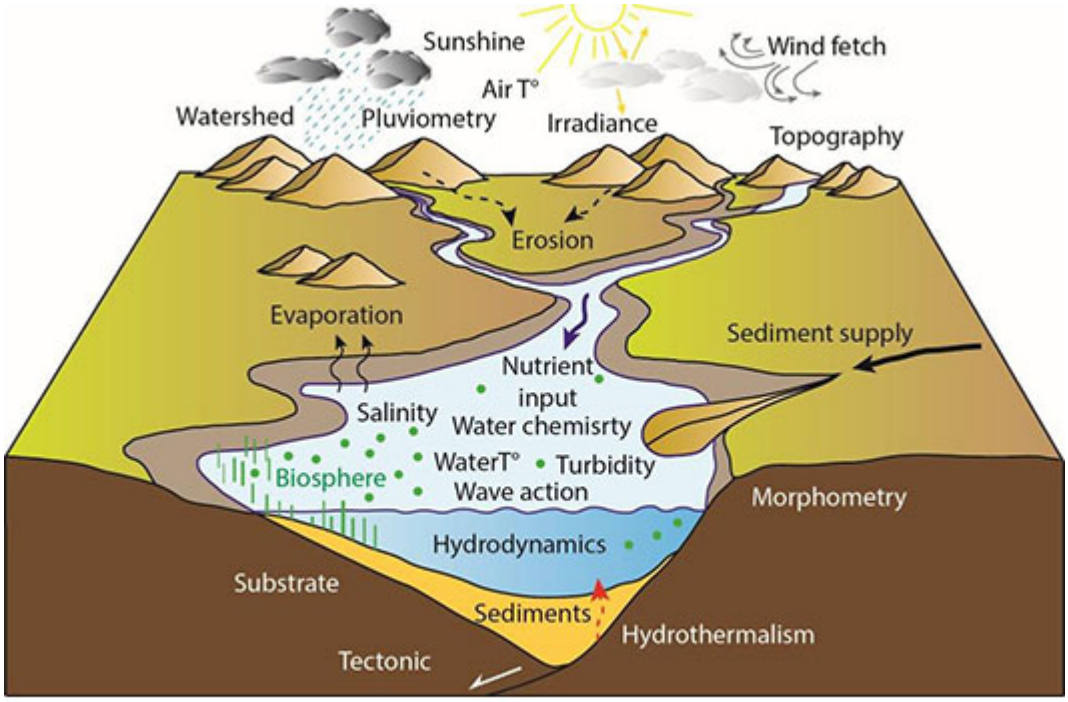


Schéma illustrant quelques paramètres de contrôle d'un écosystème lacustre.

Le travail de thèse a porté sur le couplage, rarement réalisé, **entre des approches de sédimentologie, paléontologie, paléobotanique et géochimie pour la caractérisation des séries sédimentaires lacustres**(1), **d'âge priabonien**, du **Sud-Est de la France**. Il s'agit d'**une période clé de l'histoire de la Terre**, enregistrant les prémices de l'EOT[b] : la dernière plus grande crise climatique des 50 derniers millions d'années.

Ce travail a montré le poids de l'instabilité climatique d'avant-crise sur l'écosystème(2).

Ses résultats apportent **des clés pour la compréhension et la modélisation de problématiques environnementales** telles que l'eutrophisation[c] et la salinisation des masses d'eau continentales. Ils seront intégrés dans les réflexions en cours à IFPEN afin de raffiner la modélisation stratigraphique et de les adapter aux problématiques environnementales actuelles.

***a*-** *Du fait de leur caractère généralement clos et de leur petite taille avec, en outre, des eaux chimiquement très variables.*

***b*-** *Transition éocene-oligocene (ou « Grande coupure »).*

***c*-** *Accumulation excessive de nutriments (P, N, K) dans le système aquatique.*

** Thèse intitulée* ***« Caractérisation sédimentologique, stratigraphique et paléoenvironnementale du système carbonaté lacustre à salinité variable du bassin d'Alès et des régions limitrophes (Priabonien, S-E France) : implications paléoclimatiques et paléogéographiques ».***

(1) ***A. Lettéron****, F. Fournier,* ***Y. Hamon****, L. Villier, J-P. Margerel, A. Bouche, M. Feist,* ***P. Joseph****, Multi-proxy paleoenvironmental reconstruction of saline lake carbonates: Paleoclimatic and paleogeographic implications (Priabonian-Rupelian, Issirac Basin, SE France), 2017. Sedimentary Geology, Vol. 358, pp. 97?120.*

>> DOI: 10.1016/j.sedgeo.2017.07.006

(2) ***A. Lettéron, Y. Hamon***, *F. Fournier, M. Séranne, P. Pellenard,* ***P. Joseph****, Reconstruction of a saline, lacustrine carbonate system (Priabonian, St-Chaptes Basin, SE France): Depositional models, paleogeographic and paleoclimatic implications, 2018. Sedimentary geology, Vol. 367, pp. 20-47.*
>> DOI: 10.1016/j.sedgeo.2017.12.023

Contact scientifique : **youri.hamon@ifpen.fr**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

Les séries sédimentaires lacustres : une archive des changements environnementaux passés pour mieux comprendre le présent

Thèse de Mohamed Essadki*

Les écoulements diphasiques gaz-liquide sont au cœur de nombreuses applications industrielles[a] pour lesquelles la simulation numérique est un outil d'aide au dimensionnement et à l'optimisation. Pour ce faire, elle se doit d'être prédictive et avec un coût de calcul raisonnable.

Si la simulation d'un écoulement monophasique répond déjà à ces exigences, c'est loin d'être le cas en diphasique.

Dans le domaine de l'injection notamment, **la topologie des écoulements est très complexe**, avec différentes zones[b] en forte interaction. Ces dernières sont décrites par des modèles physiques différents dont le couplage ultérieur est compliqué à réaliser, rendant difficile la construction de modèles prédictifs utilisables pour des simulations à l'échelle industrielle.

Ce travail a consisté à rechercher une approche unifiée originale pour décrire toutes ces topologies d'écoulement.

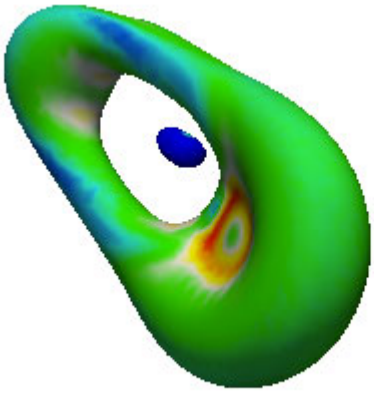
La démarche suivie a porté sur :

- **des statistiques sur l'interface** pour identifier de nouvelles variables géométriques valables dans tous les régimes d'écoulement(1),
- **de l'analyse numérique avancée** qui a permis de mettre en œuvre ces variables dans un modèle eulérien[c] d'écoulement(2),
- **de la géométrie algorithmique** pour calculer ces variables dans des DNS[d] d'écoulement (figure) afin de proposer de premières fermetures[e] pour le modèle.

Ce nouveau modèle, implanté **dans un code de calcul 3D parallèle**, a démontré sa robustesse et son coût raisonnable sur de premières simulations de jets.

Une seconde contribution de la thèse réside dans un **outil d'analyse de l'interface gaz-liquide à une échelle**

fine, pouvant être utilisé pour caractériser des résultats de **calculs de type DNS**. **Son usage permettra d'améliorer les modèles moyennés à une échelle supérieure, en leur proposant de nouvelles fermetures**.



Déformation d'une goutte dans une simulation directe diphasique.

a *- Par exemple, processus d'injection dans le domaine automobile ou aéronautique, procédés de génie chimique.*

b *- Un cœur dense de liquide, des gouttelettes et des filaments de toutes formes.*

c *- Un* ***modèle eulérien*** *simule la phase liquide continue, par opposition à un modèle particulaire ou de gouttes.*

d *-* ***Direct Numerical Simulation****.*

e *- Estimations par des expériences physiques ou numériques de termes de modèles qui ne peuvent être calculés directement.*

** Thèse intitulée «* ***Contribution to a unified Eulerian modeling of fuel injection: from dense liquid to polydisperse evaporating spray*** *»*

(1) ***M. Essadki, S. de Chaisemartin****, M. Massot, F. Laurent, A. Larat &* ***S. Jay****. Adaptive Mesh Refinement and High Order Geometrical Moment Method for the Simulation of Polydisperse Evaporating Sprays, OGST, Vol. 71, n°5, Sept.–Oct. 2016*
>> DOI : 10.2516/ogst/2016012.

(2) ***M. Essadki, S. de Chaisemartin****, L. Drui, F. Laurent, M. Massot. SIAM J., High Order Moment Model for Polydisperse Evaporating Sprays towards Interfacial Geometry Description, SIAM J. Appl. Math., 78(4), 2003–2027. (25 pages)*
>> DOI : 10.1137/16M1108364.

Contact scientifique : **stephane.de-chaisemartin@ifpen.fr**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

L’union fait la force : une nouvelle approche pour simuler les écoulements complexes

Thèse de Xavier Mangenot*

Déterminer les conditions de température d’épisodes géologiques passés est **un enjeu important pour la recherche en géosciences**. Elles déterminent en effet :
- les propriétés physiques et mécaniques,
- ainsi que la réactivité chimique des matériaux géologiques,
- et ont influencé la formation de toutes les ressources énergétiques du sous-sol.

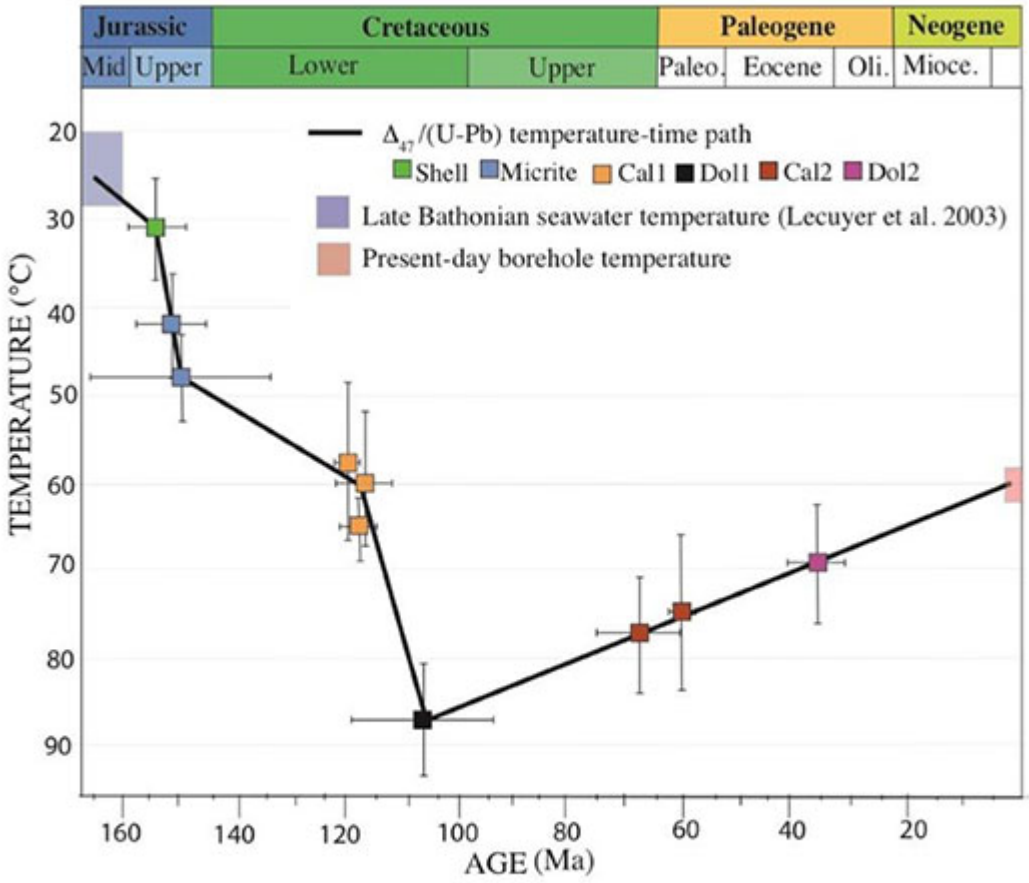
Depuis les années 60, la reconstitution de l’histoire thermique des bassins sédimentaires s’est appuyée sur les **propriétés chimiques et physiques de la matière organique** présente dans les sédiments puis sur des marqueurs minéraux plus ou moins fiables.

Depuis quelques années, ont émergé **deux nouveaux outils isotopiques prometteurs** :
- la thermométrie $?_{47}$
- et la chronométrie U-Pb par LA-ICP-MS[a].

Ils permettent de déterminer respectivement **la température et l’âge absolus de cristallisation de ces minéraux**, **avec une précision jusque-là inégalée**[1, 2].

Ce travail de thèse les a couplés dans une nouvelle approche, dénommée **thermo-chronométrie $?_{47}$/(U-Pb) des carbonates**[3], qui permet **un calage plus précis de l’histoire thermique des bassins pour la modélisation**.

Testée sur le bassin de Paris, **cette approche** a permis une reconstruction directe et précise du chemin temps-température sur plus de 150 millions d’années d’une couche géologique (figure). **De par ses performances et sa simplicité d’utilisation**, elle **constitue une petite révolution dans l’univers des géosciences pour l’étude des bassins sédimentaires**.



Histoire thermique reconstruite par le couplage de températures Δ47 (axe y) et d'âges U-Pb (axe x).

[a]- *Spectrométrie de masse avec plasma à couplage inductif, avec ablation laser.*

** Thèse intitulée* ***« Contributions du thermomètre ?47 et du chronomètre U-Pb à l'étude de l'histoire diagénétique, thermique, et hydrogéologique des réservoirs carbonatés du Jurassique Moyen du bassin de Paris »***

(1) X. Mangenot, M. Gasparrini, V. Rouchon*, M. Bonifacie, Basin?scale thermal and fluid flow histories revealed by carbonate clumped isotopes (?47) – Middle Jurassic carbonates of the Paris Basin depocentre, (2018), Sedimentology.*
>> DOI: 10.1111/sed.12427

(2) ***X. Mangenot****, M. Bonifacie,* ***M. Gasparrini****, A. Götz, C. Chaduteau, M. Ader, V. Rouchon, Coupling ?$_{47}$ and fluid inclusion thermometry on carbonate cements to precisely reconstruct the temperature, salinity and ?18O of paleo-groundwater in sedimentary basins, (2017), Chemical Geology.*
>> DOI: 10.1016/j.chemgeo.2017.10.011

(3) ***X. Mangenot, M. Gasparrini****, A. Gerdes, M. Bonifacie,* ***V. Rouchon****, An emerging thermo-chronometer for carbonate bearing-rocks: ?$_{47}$/(U-Pb). Geology (2018) 46 (12): 1067-1070*

>> DOI: 10.1130/G45196.1

Contact scientifique : **marta.gasparrini@ifpen.fr**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

Un nouveau regard sur l'histoire géologique des bassins sédimentaires grâce à la thermo-chronométrie

Thèse de Fabien Caron*

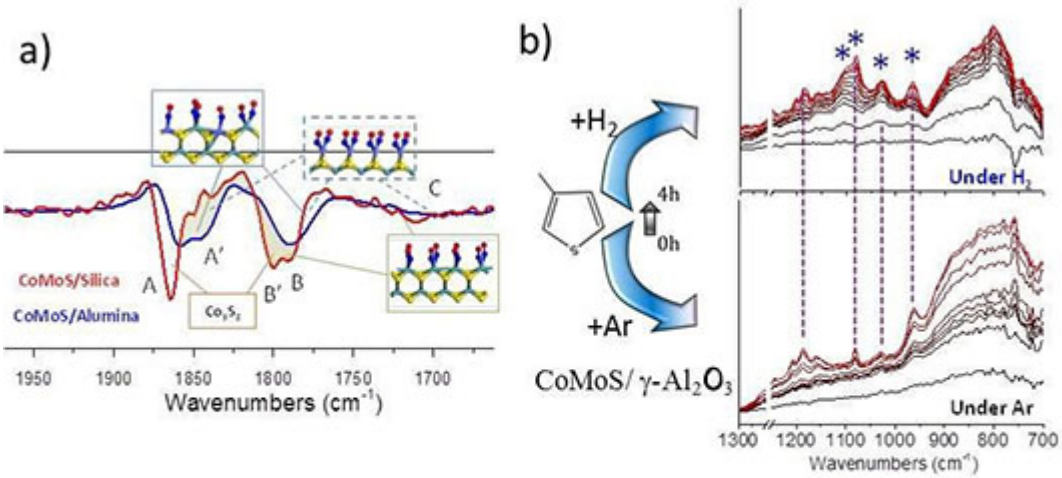
Les contraintes environnementales qui pèsent sur la production d'essences sans soufre à haut indice d'octane imposent d'améliorer la sélectivité des catalyseurs d'hydrodésulfurisation (HDS) **des molécules soufrées**[a].

Face à cet enjeu industriel, **il est fondamental d'améliorer la compréhension des mécanismes réactionnels qui conditionnent cette sélectivité à l'échelle atomique**.

Grâce à des études cinétiques, par expérimentation à haut débit, **l'hypothèse d'un effet du support sur le fonctionnement des sites de la phase active**[b] **a été confirmée** : la sélectivité du CoMoS est différente selon la nature de son support (alumine-gamma, alumine-delta ou silice).

Une approche multitechnique combinant **microscopie à haute résolution**, **spectroscopie infrarouge** (figure) **et modélisation** *ab initio*[c], a permis d'expliquer ce fait. Il est dû à l'impact du support sur la nanostructure de la phase active CoMoS et sur la spéciation[d] des sites promus.

.



Techniques de spectroscopie IR employées
a) Spectres IR de CoMoS/silice et /γ-alumine saturés en NO[1]
b) Suivi ATR-IR in situ de l'interaction du 3-methylthiophène sur CoMoS/γ-alumine[2].

La conception d'une unité dédiée couplant chromatographie gazeuse et IR *in situ* **a** ensuite **permis d'explorer**, pour la première fois, **la formation d'intermédiaires sur le catalyseur dans des conditions proches de celles du procédé industriel**.

Ce **travail**, mené **en collaboration avec l'université de Turin**, a débouché sur **une méthodologie de caractérisation operando des catalyseurs, innovante et prometteuse pour la recherche fondamentale**.

a *- Tout en limitant l'hydrogénation des alcènes (hydrocarbures insaturés de formule C_nH_2), pour maintenir l'indice d'octane.*

b *- En l'occurrence du disulfure de molybdène, promu par du cobalt (CoMoS).*

c *- Reposant sur les lois physiques de base.*

d *- Forme chimique et structurale sous laquelle se trouve un élément.*

** Thèse intitulée* ***« Bridging the gap between spectroscopic and catalytic properties of supported CoMoS catalysts »***

(1) ***F. Caron, M. Rivallan, S. Humbert, A. Daudin****, S. Bordiga,* ***P. Raybaud****. Active sites speciation of supported CoMoS phase probed by NO molecule: A combined IR and DFT study, J. Catal. 361 (2018) 62.*
>> DOI : 10.1016/j.jcat.2018.02.017

(2) ***F. Caron, M. Rivallan, A. Daudin****, S. Bordiga,* ***P. Raybaud*** *(en préparation)*

Contacts scientifiques : **antoine.daudin@ifpen.fr** - **mickael.rivallan@ifpen.fr**

> NUMÉRO 35 DE SCIENCE@IFPEN

Sélectivité des catalyseurs : le spectre mène l'enquête
Numéro 35 de Science@ifpen - Publications de jeunes docteurs
07 décembre 2018

Lien vers la page web :