

Rédigé le 16 octobre 2019 15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

ques **Sciences de l'ingénieur**



Pour Rabelais, « *Science sans conscience n'est que ruine de l'âme* » mais que dire d'une science sans partage ni collaboration ?! Car si, par essence, la recherche scientifique se nourrit des connaissances déjà acquises et de l'analyse des travaux antérieurs, intégrer des compétences externes est une clé incontournable du succès.

IFPEN déploie ce principe dans ses partenariats de recherche fondamentale, en puisant à la source dans le biotope très dense de la recherche, afin de générer ou faire monter en puissance des partenariats qui sont stratégiques au regard de sa politique scientifique. **Les travaux collaboratifs concourent à résoudre la cinquantaine de défis scientifiques identifiés comme bloquants** pour les recherches dans ses orientations stratégiques : mobilité durable, énergies nouvelles, climat et environnement, hydrocarbures responsables. Primordiaux pour la recherche et l'innovation, ces travaux prennent la forme de thèses, postdoctorats, séjours de visiteurs scientifiques, projets collaboratifs ou feuilles de route formalisées par un accord-cadre.

Ces collaborations sont illustrées ici par des travaux dans différents domaines scientifiques et pour diverses applications. Ils sont autant d'exemples des bénéfices de la recherche ouverte à laquelle IFPEN contribue de longue date avec conviction.

Bonne lecture !

Isabelle Morelon
Direction scientifique IFPEN



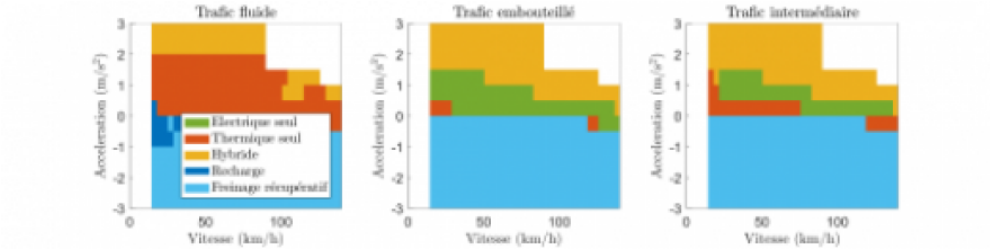
Voir le PDF de la lettre

LES BRÈVES

La collaboration scientifique engagée en 2015 avec l'Inria couvre deux domaines : « **performance numérique et informatique des simulateurs** » et « **commande et optimisation des systèmes complexe**s ». Une thèse menée dans ce second cadre(1) contribue à un usage optimisé de l'énergie à bord des véhicules hybrides, de manière à profiter du plein potentiel de cette technologie en matière de **réduction d'émissions de CO_2**.

La répartition entre thermique et électrique est réalisée par un algorithme, appelé **gestionnaire d'énergie** (GE). Cependant, celui-ci ne prend pas en compte l'impact des conditions de trafic, facteur important pour la consommation. Il en résulte une répartition non optimisée entre les deux sources.

Dans l'approche proposée, la dynamique du véhicule est modélisée comme un processus aléatoire, sensible aux différentes caractéristiques topologiques de la route et aux situations de trafic diverses(2) . Cette modélisation est rendue possible grâce aux flux massifs de données, de mobilité et de trafic, remontés des véhicules[a]. Grâce à cela, le nouveau GE pourra implémenter des stratégies de contrôle basées sur des techniques d'optimisation dynamique stochastique. Il sollicitera alors différemment la répartition entre thermique et électrique selon les conditions de trafic, tel qu'illustré dans la figure.



Loi de gestion d'énergie du véhicule hybride en fonction de trois conditions de trafic sur un tronçon routier.

Les résultats obtenus à partir de données réelles, prises dans les trois conditions sur un tronçon de quelques kilomètres d'autoroute, démontrent un bénéfice en termes de consommation globale d'énergie. Il convient désormais de valider cette nouvelle stratégie de contrôle sur une zone géographique plus large.

a - Ce travail a utilisé des données fournies par l'application pour smartphone Geco air.

---

*(1) **A. Le Rhun**, A stochastic optimal control for the energy management of a hybrid electric vehicle under traffic constraints, soutenance prévue en décembre 2019.*

*(2) **A. Le Rhun**, F. Bonnans, **G. De Nunzio**, **T. Leroy**, and P. Martinon, IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems, pp. 1–10, 2019.*
DOI : 10.1109/TITS.2019.2923292

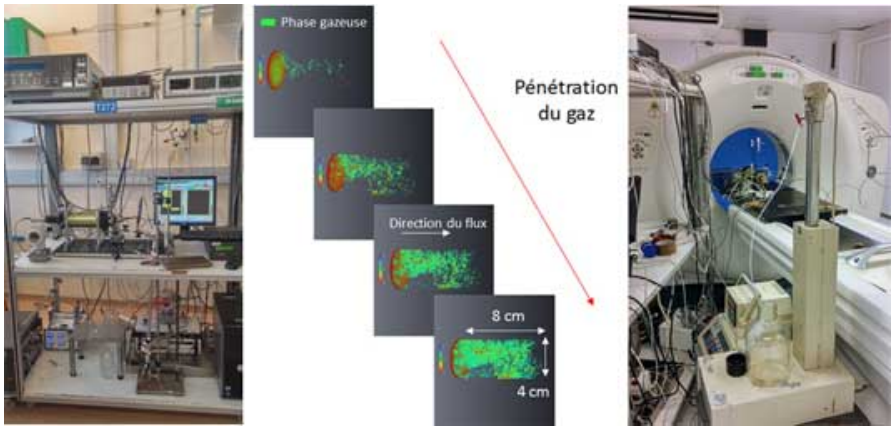
Contact scientifique : **Thomas Leroy**

>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

Optimisation de la gestion de l’énergie des véhicules hybrides dans le cadre du partenariat avec l’Inria

Depuis dix ans, IFPEN mène des actions de R&I sur la **surveillance géochimique du stockage géologique de CO_2**, afin de mieux appréhender les **flux hydriques naturels** pouvant être impactés par une fuite éventuelle au niveau de la **zone non saturée** (ZNS)[a]. IFPEN a aussi été partenaire de deux projets Ademe[b] qui ont permis de valider un concept d'alerte basé sur des traceurs naturels associés au CO_2(1).

Entre 2014 et 2016, Adrian Cerepi[c], coordinateur de ces projets, a été visiteur scientifique à IFPEN et a collaboré avec **Bruno Garcia** (direction Géosciences) à la caractérisation du sol, via des mesures électriques, pour déterminer en temps réel les paramètres pétrophysiques indispensables à la caractérisation de la roche encaissante. Ce travail a débouché sur une méthodologie et la mise au point d'un **dispositif unique pour déterminer et suivre en temps réel la perméabilité relative d'un milieu poreux**, à partir de mesures électriques et en tenant compte des interactions géochimiques, le tout sous imagerie scanner (figure).



Ensemble expérimental pour la mesure et l'observation combinées de la perméabilité de milieux poreux.

Les deux chercheurs ont également coencadré une thèse à fortes retombées[d] sur ce sujet(2).

Aujourd'hui, la collaboration se poursuit au travers du projet Ademe « Aquifer-CO_2 Leak 2019-2023 » pour suivre l'évolution d'un panache de CO_2 et des traceurs associés, dans la ZNS mais aussi dans une nappe en subsurface. Une méthodologie intégrant mesures géochimiques et géoélectriques, ainsi qu'une technologie de monitoring en temps réel, seront développées et validées sur un site pilote[e].

a - Partie du sol ou du sous-sol située à l'interface entre la couche la plus externe (pédosphère) et la nappe phréatique.
b - CO_2-Vadose (2009-2013) et DEMO-CO_2 (2013-2016), portés par l'université de Bordeaux.
c - Professeur à l'ENSEGID (École nationale supérieure en environnement, géoressources et ingénierie du développement).
d - Trois articles dans des revues scientifiques à comité de lecture et deux brevets.
e - Site pilote de Saint-Émilion.

*(1) **B. Garcia**, **P. Delaplace**, **V. Rouchon**, C. Magnier, C. Loisy, G. Cohen, C. Laveuf, O. Le Roux, A. Cerepi. International Journal of Greenhouse Gas Control, vol. 14, (2013)*

*(2) **A. Chérubini**, Utilisation des méthodes de polarisation spontanée et polarisation provoquée pour la détection de CO_2 en milieu poreux carbonaté. Thèse soutenue le 25 mars 2019.*

Contact scientifique : **bruno.garcia@ifpen.fr**

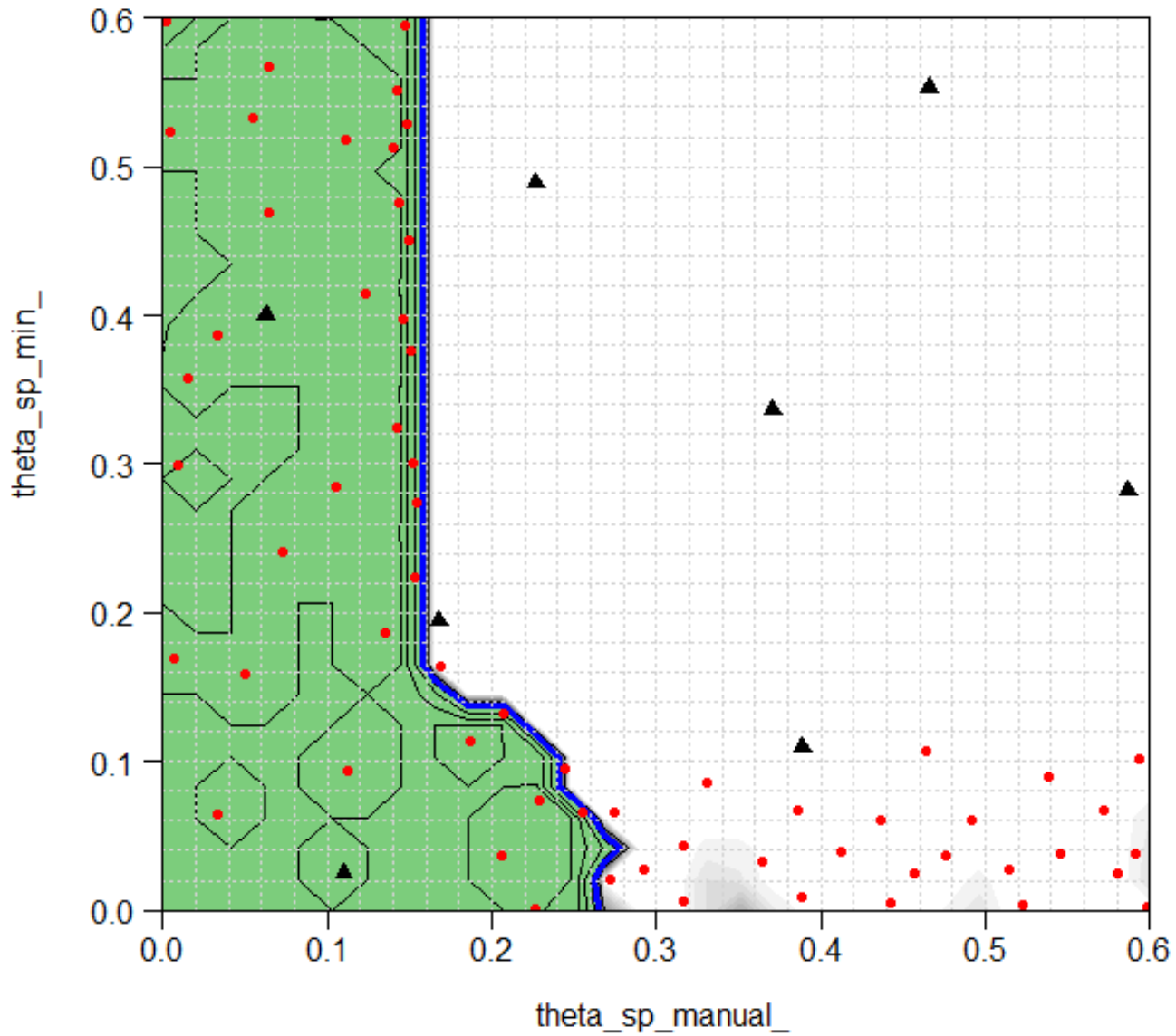
>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

Un visiteur scientifique contribue à améliorer la surveillance des stockages de CO2

La **chaire en mathématiques appliquées OQUAIDO**[a], lancée en janvier 2016 et hébergée par l'École des mines de Saint-Étienne, réunit des partenaires académiques et industriels[b] pour résoudre des questions liées à l'exploitation des simulateurs numériques, telles que la **quantification d'incertitudes, l'inversion et l'optimisation**. Son but est de travailler sur des problèmes de recherche « amont » guidés par des applications pratiques.

Une thèse(1) a été réalisée dans le cadre de cette chaire entre l'université Grenoble Alpes, l'École centrale de Lyon et IFPEN. L'objectif applicatif était de **paramétrer le contrôle d'un système de dépollution de véhicules pour respecter les normes d'émissions de gaz polluants**.

Parmi les multiples sources d'incertitudes sur le contrôle de ce système, la plus impactante est la variabilité du cycle de conduite en conditions réelles. En pratique, le respect des normes est donc assuré en moyennant, sur un échantillon donné de cycles, les valeurs d'émissions estimées par un simulateur numérique (figure).



Pour deux paramètres de contrôle, estimation (en vert) du domaine de respect de la norme d'émissions de NH3 (points initiaux simulés en noir, points ajoutés par la méthode itérative

en rouge).

Les temps de calcul liés aux simulations ont ainsi pu être réduits, à l'aide d'une **approximation du simulateur par processus gaussien** et d'une réduction de dimension de la variable fonctionnelle. Le couplage de ces techniques avec une méthode itérative de réduction d'incertitudes a non seulement diminué drastiquement le nombre de simulations requises, par rapport aux méthodes de l'état de l'art, mais également permis
de contrôler les erreurs d'estimation du domaine admissible pour les paramètres de contrôle du système(2).

a - Optimisation et QUAntification d'Incertitudes pour les Données Onéreuses.

b - BRGM, CEA, CNRS, École centrale de Lyon, IFPEN, IRSN, École des mines de Saint-Étienne, Safran, Storengy, université Grenoble-Alpes, université Nice Sophia Antipolis, université de Toulouse Paul Sabathier.

---

*(1) **M. R. El Amri**, Analyse d'incertitudes et de robustesse pour les modèles à entrées et sorties fonctionnelles, thèse de doctorat de l'université
Grenoble-Alpes, soutenue en 2019.*

*(2) **M. R. El Amri**, C. Helbert, **O. Lepreux**, **M. Munoz Zuniga**, C. Prieur, **D. Sinoquet**, Data-driven stochastic inversion under functional uncertainties, Statistics and Computing journal, 2019 Sept.*

Contact scientifique : **Delphine Sinoquet**

>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

CONTACT



Delphine SINOQUET

Ingénieur de recherche / chef de projet en optimisation
Docteur en Mathématiques Appliquées

Contrôle robuste d’un système de dépollution de véhicule grâce à la chaire OQUAIDO

L’essor de la production d’énergie éolienne est un enjeu qui dépend en grande partie de l’amélioration de son rendement énergétique et
de sa rentabilité économique. Pour maximiser la performance et la durée d’exploitation, la mise en oeuvre de lois de contrôle avancées et innovantes est une voie prometteuse à laquelle IFPEN a contribué au travers du projet SmartEole (2015-2019), opéré par un consortium
de partenaires publics et privés[a].

Ce projet a conduit au développement du concept de rotor intelligent pour améliorer les conditions de fonctionnement des éoliennes, en intégrant de nouveaux systèmes de mesure, notamment un capteur lidar[b] positionné sur le toit de la nacelle (figure), couplés à des algorithmes innovants pour le pilotage.

Ainsi, une prévision à court terme des propriétés du vent au niveau des pales a été élaborée à partir de la mesure lidar(1), puis associée à une stratégie de pilotage originale qui s’appuie sur ces informations de vent reconstruites(2). L’ensemble permet un pilotage optimal de l’orientation de la nacelle et des pales. Les performances de ce contrôle assisté, évaluées en simulation, prévoient, selon les conditions de vent, une réduction de 15 à 30 % de la sollicitation en fatigue.

Des stratégies d’optimisation du pilotage d’une ferme éolienne entière ont également été développées, sur la base de techniques de redirection de sillage, afin de minimiser les interférences entre éoliennes voisines et accroître la production globale.



Ces travaux, réalisés en simulation numérique sur la base de données mesurées sur site, ont permis un progrès important sur les approches explorées. De plus, les résultats obtenus ont dégagé plusieurs perspectives applicatives, comme l’intégration du contrôle assisté par lidar sur des éoliennes déjà en service (*retrofit*) ou la supervision optimisée de parcs éoliens complets.

a - https://anr.fr/Projet-ANR-14-CE05-0034
b - Light Detection And Ranging (ou télédétection par laser).

---

(1) ***F. Guillemin***, ***H.-N. Nguyen***, ***G. Sabiron***, ***D. Di Domenico***, *M. Boquet, Torque 2018, Milan.*

(2) ***D. Di Domenico***, ***F. Guillemin***, ***M. Laraki***, ***G. Sabiron***, *WindEurope 2017, Amsterdam.*

Contact scientifique : **fabrice.guillemin@ifpen.fr**

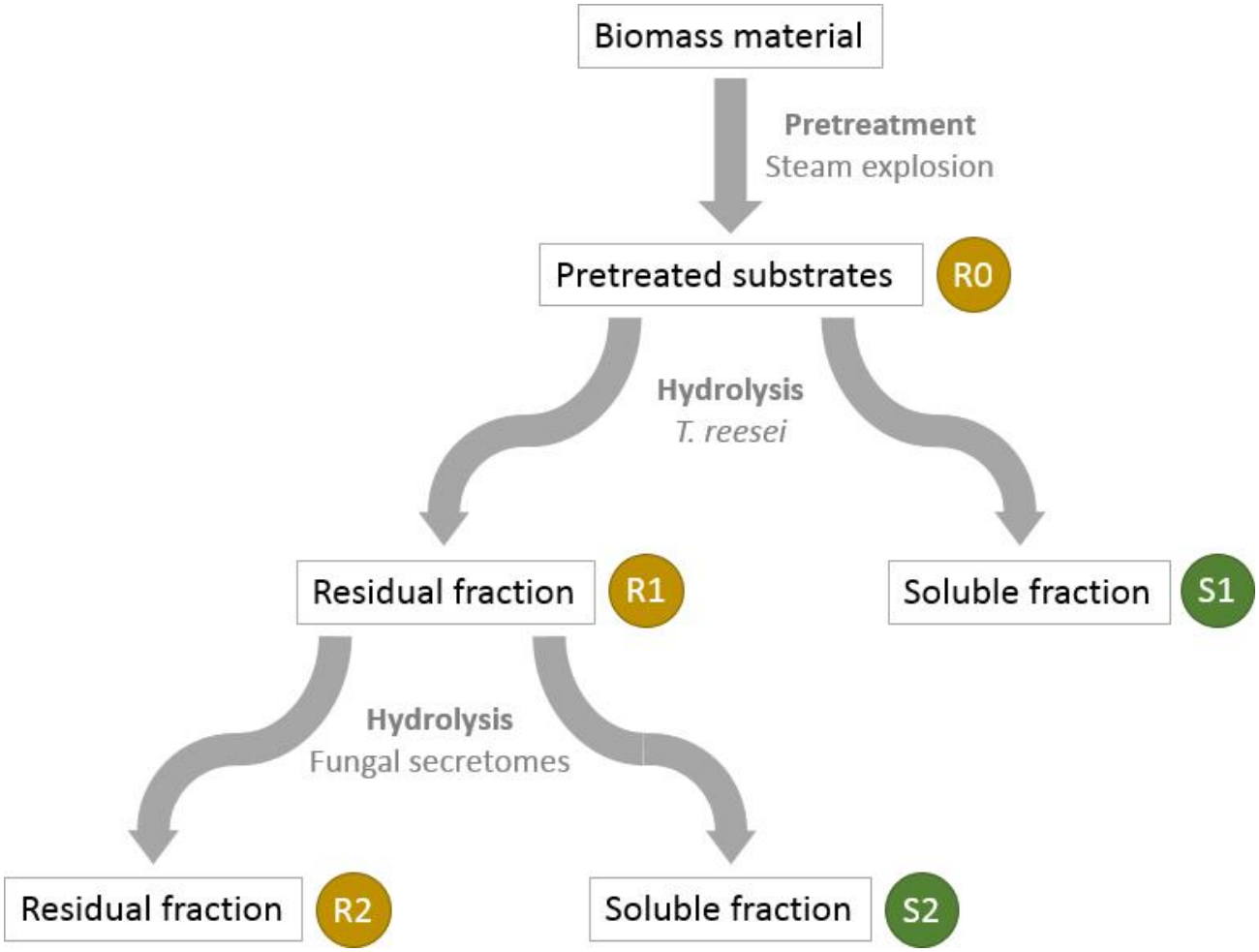
>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

Le projet SmartEole pour un meilleur usage de la ressource éolienne grâce à des rotors intelligents

La biomasse lignocellulosique est une matière première attractive pour la production de carburants et d'intermédiaires chimiques car elle est
abondante et dotée d'une empreinte environnementale réduite par rapport au fossile. Par contre, sa forte complexité structurale et chimique est un obstacle au développement de procédés de transformation viables. La décomposition biochimique des polymères de sucres nécessite ainsi un prétraitement physico-chimique qui déstructure ce substrat complexe pour permettre aux catalyseurs enzymatiques (issus du champignon **Trichoderma reesei**) d'y accéder. Toutefois, leur conversion par hydrolyse reste incomplète car une partie de ces polymères demeure inaccessible.

Le **projet ANR F'Unlock** (IFPEN, CNRS, Inra) a cherché à approfondir les causes de cette « récalcitrance » tout en recherchant de nouvelles enzymes plus efficaces pour la surmonter.

L'analyse structurale et physico-chimique d'échantillons hydrolysés, contenant plus ou moins de fractions récalcitrantes, a permis de trouver des **marqueurs pertinents de la dégradabilité**[a], afin de guider la sélection d'enzymes. De plus, de nouvelles enzymes, issues de la biodiversité fongique, ont été testées sur des fractions partiellement hydrolysées et plus récalcitrantes R1 (figure) à travers une seconde hydrolyse enzymatique[b].



Méthodologie d'hydrolyse enzymatique séquentielle des substrats.

Outre son intérêt pour conduire la sélection d'enzymes, l'identification des marqueurs a permis de

mieux comprendre l'**origine de la récalcitrance de la biomasse**, en vue de travaux ultérieurs[1]. Par ailleurs, aucun des mélanges d'enzymes testés n'ayant été plus performant que le mélange de référence, il semble qu'une forte diversité enzymatique ne soit pas essentielle. Une transformation plus complète de la biomasse pourrait donc reposer sur quelques activités catalytiques clés, associées à un prétraitement efficace.

a - Notamment le contenu en lignine, la cristallinité de la cellulose, la capacité d'adsorption d'eau.
b - Donnant lieu aux fractions résiduelles R2 (figure).

---

*(1) G. Paës, D. Navarro, **Y. Benoit**, **S. Blanquet**, B. Chabbert, **B. Chaussepied**, P. M. Coutinho, S. Durand, I. V. Grigoriev, M. Haon, L. Heux C. Launay, **A. Margeot**, Y. Nishiyama, S. Raouche, M. N. Rosso, E. Bonnin, J. G. Berrin. Biotechnol Biofuels. 2019 Apr 1; 12:76.*
DOI : 10.1186/s13068-019-1417-8

Contacts scientifiques : **senta.blanquet@ifpen.fr** et **antoine.margeot@ifpen.fr**

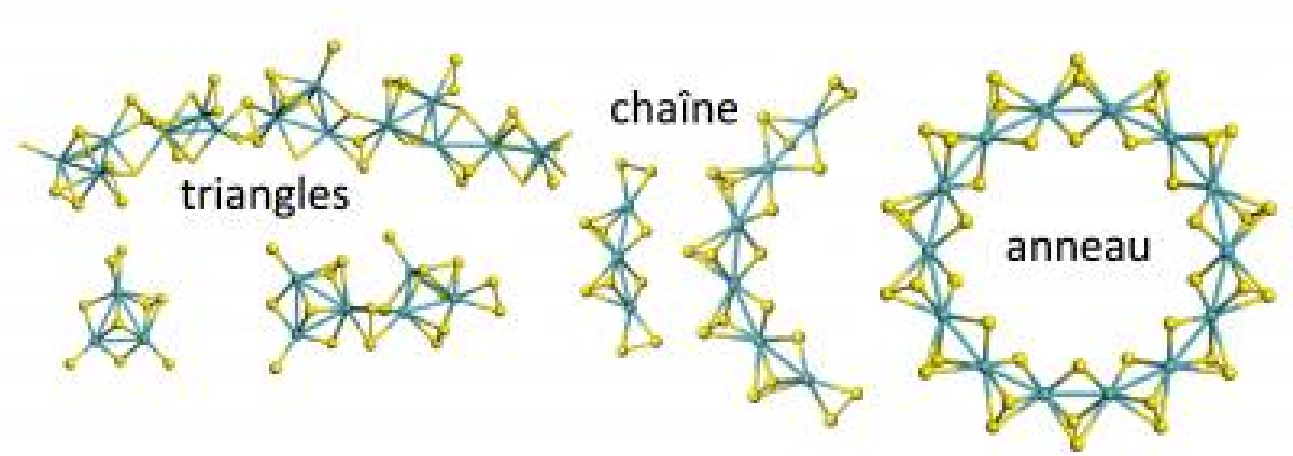
>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

Le projet F'Unlock pour déverrouiller l'hydrolyse de la biomasse végétale à l'aide d'enzymes

La 1re chaire industrielle au sein du projet d'IdexLyon[a], **ROAD4CAT** (RatiOnAl Design for CATalysis), associe depuis juin 2018 IFPEN et le laboratoire de Chimie de l'ENS de Lyon[(1)]. Son titulaire **Pascal Raybaud**, chercheur de la direction Catalyse, Biocatalyse et Séparation, y délivre en particulier des cours magistraux de niveau Master sur les thématiques concernées.

La stratégie scientifique de la chaire propose une **approche de recherche innovante sur la chimie computationnelle au niveau quantique**, appliquée à la conception rationnelle de catalyseurs hétérogènes ainsi qu'à la compréhension fine (à l'échelle atomique) des mécanismes à l'oeuvre, depuis leur préparation (genèse des phases actives) jusqu'à leur fonctionnement (propriétés clés) en conditions réactionnelles. Les travaux mobiliseront dix chercheurs des équipes partenaires (IFPEN, ENSL, UCBL, CNRS), quatre doctorants et cinq post-doctorants, sur cinq ans.

Les travaux en cours des deux premiers doctorants et des deux premiers post-postdoctorants ont fourni des résultats prometteurs qui feront l'objet de publications scientifiques :
• par la simulation quantique de propriétés structurales, électroniques et spectroscopiques, il devient possible de **mieux comprendre la phase amorphe MoS_3** (figure), intermédiaire clé des mécanismes d'activation de la phase MoS_2, laquelle est susceptible d'être employée en réaction d'hydrodésulfuration, en photoréduction du CO_2 ou en réaction d'évolution de l'hydrogène ;
• l'interaction d'additifs inorganiques avec le support alumine-gamma employé pour les catalyseurs industriels est décrite par une **approche combinée modélisation quantique - spectroscopie RMN** ;
• l'emploi de méthodes quantiques avancées permet aussi une **meilleure prédiction des propriétés optiques et des mobilités des charges au sein de matériaux oxysulfures de molybdène**. La piste des carburants solaires, produits par photocatalyse, est ainsi explorée.



Différents types de nano-agrégats représentatifs de la phase amorphe MoS3.

Cette recherche aura une portée environnementale et sociétale liée à l'amélioration de l'éco-efficience des procédés catalytiques et à l'économie d'atomes métalliques engagés dans les catalyseurs.

a - Institut d'excellence, ANR-16-IDEX-0005.

---

(1) Rapport d'activité 2018 d'IFPEN, page 35.

Contact scientifique : **Pascal Raybaud**

>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

CONTACT



Pascal RAYBAUD

Directeur du Labcom ERACLECE
Chercheur en Catalyse
Un an d’existence pour la chaire ROAD4CAT

Afin d'accompagner le développement d'innovations pour la transition énergétique, le CNRS, l'ENS de Lyon, IFPEN, Sorbonne université, l'université Claude Bernard Lyon 1 et l'université de Strasbourg ont créé, pour une durée de cinq ans, le **laboratoire commun de recherche (LCR) CARMEN** où ils mettent en commun leurs compétences et savoir-faire dans le domaine de la caractérisation des matériaux pour les énergies nouvelles. L'objectif est de **renforcer les connaissances sur le transport moléculaire et/ou colloïdal dans des substrats poreux** et de développer de nouvelles méthodologies d'analyse fine de ces matériaux.



Ces derniers, comme les supports de catalyseurs et les sols, trouvent en effet de nombreuses applications dans les domaines de la conversion catalytique de la biomasse, des adsorbants pour la réduction des contaminants ou encore du stockage des énergies renouvelables. L'optimisation des matériaux pour les nouvelles technologies de l'énergie nécessite d'identifier les relations entre leurs propriétés structurales et chimiques, d'une part, et leurs propriétés physicochimiques (transport, tenue mécanique, etc.), d'autre part. Les travaux du **LCR CARMEN** vont donc porter sur la caractérisation multi-échelle de leur structure dans des conditions de fonctionnement les plus proches possible de la réalité, dites *operando*, afin de les relier à leurs propriétés de transport ainsi qu'à leur réactivité.

En regroupant trois équipes académiques d'excellence sur les sites de Lyon (le Centre RMN à très hauts champs), Paris (le laboratoire PHENIX de physicochimie des électrolytes et nanosystèmes interfaciaux) et Strasbourg (l'Institut de physique et des matériaux de Strasbourg) avec celles d'IFPEN, le **LCR CARMEN est un consortium unique à l'échelle internationale**. Outre la complémentarité des compétences rassemblées, il va permettre la **mutualisation d'équipements de haute performance** et la mobilisation de nombreuses techniques de caractérisation, dont des approches novatrices *operando* comme la RMN bas champ et haut champ ainsi que des techniques d'imagerie couplées à la modélisation.

Contact scientifique : **nathalie.schildknecht@ifpen.fr**

>> NUMÉRO 38 DE SCIENCE@IFPEN

Interview de Mme Claire-Marie Pradier, Directrice adjointe scientifique de l'Institut de chimie du CNRS, sur la création du laboratoire commun de recherche « CARMEN » :

Interview de M. Eric Heintzé, Directeur scientifique d'IFPEN au moment de la création du laboratoire commun de recherche « CARMEN » (Juillet 2019) :

Interview de Mme Nathalie Schildknecht, Directrice du laboratoire commun de recherche « CARMEN », et Directrice de la Direction Physique et Analyse d'IFPEN :

VOUS SEREZ AUSSI INTÉRESSÉ PAR



Recherche fondamentale

Actualités juillet 2019

Nouveau laboratoire commun de recherche sur les matériaux de la transition énergétique

Communiqués de presse

Énergies renouvelables

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

Les matériaux de la transition énergétique, objets de toutes les attentions de CARMEN

Contact



Isabelle Morelon

Responsable « Partenariats de recherche académique »

isabelle.morelon@ifpen.fr

Numéro 38 de Science@ifpen - spécial Recherche ouverte et collaborative
16 octobre 2019

Lien vers la page web :