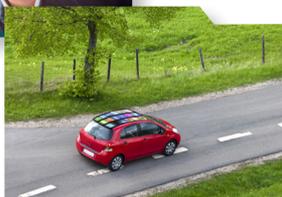


# Science@ifpen

N° 41 - Juin 2020

**NUMÉRO SPÉCIAL**  
Habilitation à diriger  
des recherches (HDR)



Recherche et formation constituent la base de l'action d'IFPEN dans laquelle nos innovations puisent leur pertinence et leur originalité.

Acteurs majeurs du dispositif, certains de nos chercheurs accèdent à l'HDR, titre universitaire le plus élevé en France, et aboutissement d'un parcours de très haut niveau. Celui-ci sanctionne le caractère original d'une démarche scientifique et reconnaît l'aptitude à élaborer et maîtriser une stratégie de recherche ainsi que la capacité à encadrer des thèses de doctorat. Au-delà d'un indicateur de l'excellence scientifique, le nombre d'HDR est la garantie d'un encadrement de qualité pour nos doctorants et d'échanges équilibrés et constructifs avec nos partenaires académiques.

Ce numéro revient sur les résultats marquants de quelques-uns de nos chercheurs qui ont récemment obtenu ce titre. De l'expérimentation à la modélisation, sur des échelles multiples de temps et d'espace, la gamme des sujets traités et des disciplines concernées est vaste, à l'image du large spectre des activités d'IFPEN. Tous ces travaux ont un dénominateur commun : une démarche scientifique construite et cohérente sur le long terme qui garantit la qualité et la pertinence de nos résultats dans le continuum recherche fondamentale-recherche appliquée.

Bonne lecture.

Olga Vizika-Kavvadias,  
Directrice scientifique

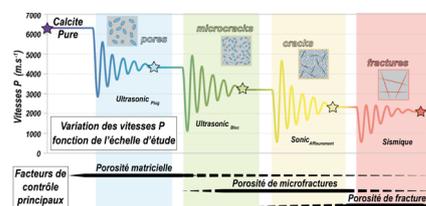
## Caractérisation et modélisation du couple faciès<sup>a</sup>-éogénèse<sup>b</sup>, état initial des réservoirs carbonatés (HDR 2017)

Les réservoirs carbonatés présentent de fortes hétérogénéités (de types et d'échelles) liées à l'origine biologique des sédiments<sup>c</sup>, mais également aux transformations diagénétiques intervenues dès leur dépôt ou très tôt après. Ce couple faciès-diagenèse précoce régit donc l'état initial et l'évolution des futurs réservoirs durant l'enfouissement. Mon HDR visait à mieux définir cet état initial pour le prendre en compte dans les modèles géologiques.

Ces travaux ont trouvé des applications directes à IFPEN pour :

- la caractérisation pluridisciplinaire et multi-échelle des carbonates<sup>d</sup>. Il s'agit d'identifier les signatures pétrophysiques et pétroacoustiques (figure) des différents faciès et les effets des altérations diagénétiques, ou de rendre compte des différents niveaux d'hétérogénéité (micro, méso et macroporosité) dans ces carbonates<sup>(1)</sup> ;
- la modélisation des modifications minéralogiques et pétrophysiques subies par un sédiment carbonaté durant la diagenèse précoce, afin de mettre au point un nouveau module pour le logiciel de modélisation stratigraphique 3D Dionisoflow<sup>e</sup>.

Dans ce second cas, la réflexion menée pour l'HDR a servi au développement de lois phénoménologiques intégrant plusieurs paramètres, comme la minéralogie initiale, le temps de résidence dans chaque zone hydrologique ou les cinétiques des processus.



Principaux facteurs de contrôle des vitesses P aux différentes échelles d'étude (du plug à la sismique)<sup>(1)</sup>.

Les systèmes sédimentaires carbonatés étudiés constituent des enregistrements très fins de changements environnementaux (climat, niveau marin, écologie des populations, etc.) dont le décodage apporte des clés pour la compréhension et la modélisation de problématiques actuelles<sup>(2)</sup>.

- a - Notion descriptive d'une roche sédimentaire basée sur son aspect et sa composition
- b - Diagenèse précoce, pour laquelle la chimie des fluides interstitiels est directement contrôlée par l'environnement de surface
- c - Laquelle définit les différents types de faciès carbonatés
- d - Dans le cadre de la thèse de C. Bailly (ENS 2019) ou du consortium Aquarius
- e - Modèle géologique numérique intégré incluant les processus sédimentaires

(1) C. Bailly, M. Adelinet, Y. Hamon, J. Fortin, 2019. *Geophysical Journal International*, 219, 2, pp. 1300-1315. DOI : 10.1093/gji/ggz365

(2) A. Letteron, Y. Hamon, F. Fournier, M. Seranne, P. Pellenard, P. Joseph, 2018. *Sedimentary geology*, 367, pp. 20-47. DOI : 10.1016/j.sedgeo.2017.12.023

Contact scientifique :  
youri.hamon@ifpen.fr

IFP Energies nouvelles (IFPEN) est un acteur majeur de la recherche et de la formation dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. De la recherche à l'industrie, l'innovation technologique est au cœur de son action.



# Simulation des écoulements réactifs multiphasiques : développements et applications dans le domaine de la combustion (HDR 2015)

Le domaine scientifique concerné par mes travaux d'HDR est celui de la modélisation numérique 3D de la combustion diphasique, associant des travaux sur la combustion turbulente et la préparation du mélange réactif.

Dans la continuité de mon doctorat, j'ai abordé plusieurs questions fondamentales comme la modélisation des transitions entre écoulements à phases séparées et dispersées, ou la modélisation des interactions chimie/turbulence dans les milieux stratifiés. Ceci m'a permis de proposer des solutions applicatives concrètement mises en œuvre. C'est ce lien entre aspects théoriques et besoins pratiques que j'ai mis en valeur dans mon HDR.

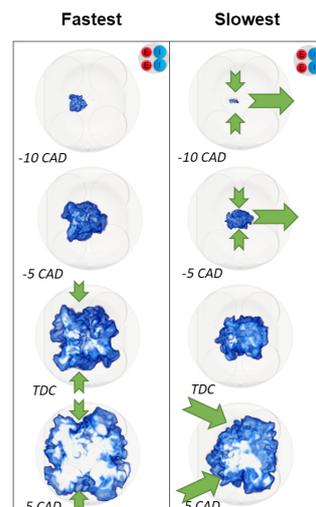
Aujourd'hui, certains modèles sont intégrés dans des logiciels utilisés dans l'industrie automobile.

La réalisation d'un outil SaaS (*Software as a Service*) pour la LES (*Large-Eddy Simulation*) est un exemple de la manière dont un tel transfert peut s'opérer. Il s'agit

d'une plateforme de calcul à distance rendant accessibles des modèles développés à IFPEN pour la combustion diphasique en LES moteur<sup>(1)</sup>.

Cet outil illustre comment le savoir acquis au cours de thèses et de travaux plus fondamentaux est rendu accessible, facilitant ainsi énormément les interactions entre recherche et industrie.

Sans quitter mon domaine de spécialité, la délivrance de mon HDR me permet d'allier avec cohérence l'encadrement de travaux doctoraux et des activités de gestion de projet R&I. ■



Calculs LES pour l'étude des acyclismes en moteur à allumage commandé avec fort excès d'air par rapport au carburant<sup>(a)(2)</sup>.

a - Comparaisons du développement de la flamme dans les cas d'une combustion rapide (*Fastest*) ou lente (*Slowest*) - TDC : point mort haut - CAD : degré d'angle de vilebrequin

Contact scientifique :  
stephane.jay@ifpen.fr

(1) A. Robert, K. Truffin, N. Iafrate, S. Jay, O. Colin, C. Angelberger, *Int. J. Engine Res.*, vol. 20, n° 7, p. 765-776.  
DOI : 10.1177/1468087418796323, 2018.

(2) O. Benoit, P. Luszcz, Y. Drouvin, T. Kayashima, P. Adomeit, A. Brunn, S. Jay, K. Truffin, C. Angelberger, *Technical Paper 2019-01-2209*, ISSN : 0148-7191, e-ISSN : 2688-3627, décembre 2019, SAE International

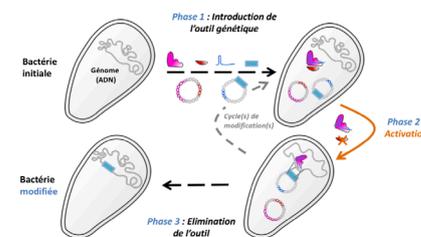
# Hydrolyse de la biomasse lignocellulosique : étude des interactions enzyme-substrat (HDR 2015)

Le périmètre de mon HDR a couvert dix années de recherche à IFPEN dans le contexte du développement de Futurol™, procédé destiné à produire du bioéthanol de 2<sup>e</sup> génération à partir de biomasses lignocellulosiques. Mes travaux m'ont permis d'apporter de nouvelles connaissances et données nécessaires à l'optimisation de ce bioprocédé :

- une 1<sup>re</sup> partie dédiée à l'impact des propriétés physico-chimiques de biomasses d'intérêt<sup>a</sup> sur les performances des deux étapes clés, i.e. le prétraitement et l'hydrolyse enzymatique ;
- la 2<sup>e</sup> partie a débouché sur l'optimisation d'une enzyme du cocktail enzymatique produit par le champignon *Trichoderma reesei* ;
- la 3<sup>e</sup> a concerné le développement de modèles mécanistiques ou prédictifs de l'étape d'hydrolyse.

L'obtention de l'HDR m'a permis d'encadrer ensuite plusieurs thèses à IFPEN en lien avec Futurol™, dont une axée sur la caractérisation multi-outils de biomasses prétraitées<sup>b</sup>.

L'expérience acquise tout au long de ce parcours a aussi facilité mon implication dans le développement d'un procédé de production biosourcé de solvants industriels (n-butanol et isopropanol) à l'aide d'une bactérie fermentaire (de type *Clostridium*). Deux thèses dirigées en collaboration avec l'université de Wageningen ont débouché sur l'acquisition de nouvelles données omiques<sup>c</sup> et la validation d'un outil génétique de type Crispr-Cas (figure) qui révolutionne actuellement le génie génétique des souches industrielles<sup>(1,2)</sup>. ■



Principe schématique de l'outil génétique d'IFPEN basé sur la technologie Crispr-Cas.

(1) M. Diallo, R. Hocq, F. Collas, G. Chartier, F. Wasels, H. S. Wijaya, M. W. T. Werten, M. W. T. Wolbert, S. W. M. Kengen, J. van der Oost, N. Lopes Ferreira, A. M. López-Contreras [2020], *Clostridium beijerinckii*. *Methods*. 172:51-60.

(2) F. Wasels, J. Jean-Marie, F. Collas, A. M. López-Contreras, N. Lopes Ferreira [2017], *Journal of microbiological methods*. 140:5-11.

a - Avec notamment une étude dédiée aux modifications produites par l'étape de prétraitement sur le miscanthus, plante à rhizome envisagée en culture pérenne dans nos contrées  
b - Thèse de J. Passicoussat : Descripteurs physico-chimiques de la biomasse lignocellulosique en hydrolyse enzymatique : vers une caractérisation in-situ (2019).  
c - <https://www.ifpennergiesnouvelles.fr/article/chimie-biosourcee-limportance-dacquies-grand-nombre-donnees-biologiques>

Contact scientifique :  
nicolas.lopes-ferreira@ifpen.fr

# Apport du traitement d'images à l'amélioration des performances de catalyseurs (HDR 2017)

Les travaux de mon HDR visaient à améliorer la performance des catalyseurs par le traitement d'images, en automatisant les analyses et en améliorant la qualité de l'information extraite des données. Les connaissances et outils qui en sont issus concernent les signaux de chromatographie ou de diffraction des rayons X (1D), les analyses par microscopie électronique (2D) ou la tomographie électronique (3D).

Cette dernière technique permet d'extraire de l'information à l'échelle du nanomètre, dimension caractéristique de la mésoporosité dans les supports de catalyseurs. Elle offre de précieuses informations sur l'efficacité et la sélectivité des matériaux catalytiques par l'étude du diamètre ou de la connectivité de ces pores. Ces données sont utilisées à la fois pour contrôler des procédures de formulation de catalyseurs et pour améliorer la compréhension des phénomènes de transport à l'échelle de la mésoporosité.

Des modèles aléatoires morphologiques (figure) ont permis de reproduire des microstructures virtuelles (3D

numériques) proches de celles observées et d'y introduire de légères modifications géométriques (taille de grains, taux de porosité, etc.) pour en étudier l'impact sur les propriétés texturales et d'usage (diffusion ou mécanique). Grâce à ces travaux en collaboration avec le milieu académique<sup>a</sup>, la caractérisation géométrique et topologique des réseaux poreux a progressé via de nouveaux descripteurs numériques de microstructures<sup>(1)</sup>.

Disponibles dans la plateforme plug im!, ces descripteurs mis en application en catalyse et biocatalyse sur des alumines<sup>(2)</sup> ont fait l'objet d'une extension au domaine des neurosciences sur des cellules vivantes, en collaboration avec le laboratoire Cervo de l'université Laval de Québec. ■

a - En particulier, le laboratoire Hubert Curien de l'université Jean Monnet et le Centre de morphologie mathématique de Mines ParisTech

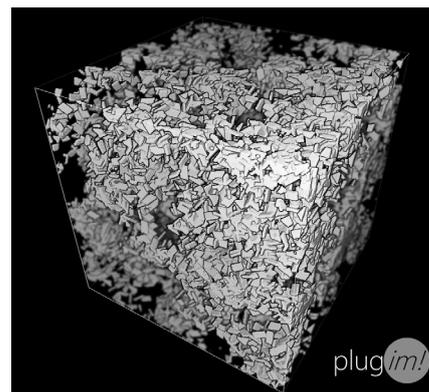


Illustration d'un modèle aléatoire morphologique de microstructure alumine à base de nanoplaquettes.

(1) J. Chaniot, M. Moreaud, L. Sorbier, T. Fournel, J. M. Becker, *Image Analysis and Stereology* 38 (1), p. 25-41 (2019).  
<https://doi.org/10.5566/ias.2039>

(2) A. T. F. Batista, W. Baaziz, A. L. Taleb, J. Chaniot, M. Moreaud, C. Legens, A. Aguilar-Tapia, O. Proux, J. L. Hazemann, F. Diehl, C. Chizallet, A. S. Gay, O. Ersen, P. Raybaud. *ACS Catal.* 10, p. 4193-4204 (2020).  
<https://doi.org/10.1021/acscatal.0c00042>

Contact scientifique :  
maxime.moreaud@ifpen.fr

## Étude des garnissages pour les colonnes de traitement du gaz naturel et de captage du CO<sub>2</sub> (HDR 2019)

Employés dans certains équipements de traitement, comme les colonnes de purification de gaz industriels, les garnissages structurés sont des empilements ordonnés de plaques métalliques ondulées qui favorisent le contact entre le gaz et un liquide circulant, tout en minimisant la perte de charge.

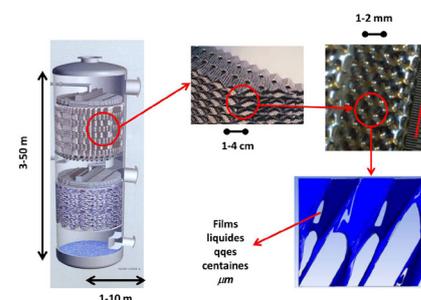
Les surfaces développées des plaques peuvent atteindre plusieurs centaines de mètres carrés par unité de volume. Le liquide qui absorbe et transforme l'élément à capter s'y écoule sous la forme de films laminaires tandis que l'écoulement du gaz est turbulent. Mon mémoire d'HDR synthétise les travaux de recherches relatifs aux colonnes à garnissages structurés, dans lesquels j'ai été impliqué en tant que chercheur, puis comme chef de projet.

Pour dimensionner et optimiser les installations, il faut connaître précisément les performances des garnissages. Dans ce but, des mesures d'hydraulique – pertes de charge, débits gaz-liquide admissibles – et de transfert de masse ont été conduites à IFPEN

sur différentes colonnes d'essais (de 150 mm à 1 m de diamètre<sup>(1)</sup>). Des échanges avec des universités partenaires ont permis de conforter les résultats obtenus.

La connaissance et la prise en compte de phénomènes multi-échelles sont nécessaires pour optimiser le choix du garnissage ou pour en développer de nouveaux (figure). Plusieurs travaux de thèse ont permis de proposer des modèles d'écoulement (suivi d'interface, milieu poreux équivalent). Un, en particulier<sup>(2)</sup>, a été consacré au mécanisme de mouillage des plaques et à l'obtention de vitesses et de rétentions locales.

L'étude des phénomènes agissant sur les écoulements à l'échelle locale se poursuit sur des dispositifs de laboratoire mais le chemin est encore long et l'expérimentation à une échelle représentative des équipements réels demeure incontournable. À cet effet, les résultats de tous ces travaux sont actuellement utilisés dans le cadre du pilote industriel du projet H2020 3D<sup>a</sup>.



Problématique multi-échelle des garnissages structurés.

Celui-ci vise à démontrer, sur un site sidérurgique d'ArcelorMittal, l'efficacité du procédé de captage du CO<sub>2</sub> utilisant comme liquide un solvant démixant issu de la recherche IFPEN. ■

a - DMX<sup>TM</sup> (Demonstration in Dunkirk)

(1) L. Hegely, J. Roesler, P. Alix, D. Rouzineau, M. Meyer, *AIChE Journal*, 63(8), 3245-3275, 2017.

(2) Z. Solomenko. Thèse de doctorat de l'université de Lyon, 2016.

Contact scientifique :  
pascal.alix@ifpen.fr

# Descripteurs de matrices oxygénées pour la transformation de biomasses lignocellulosiques (HDR 2017)

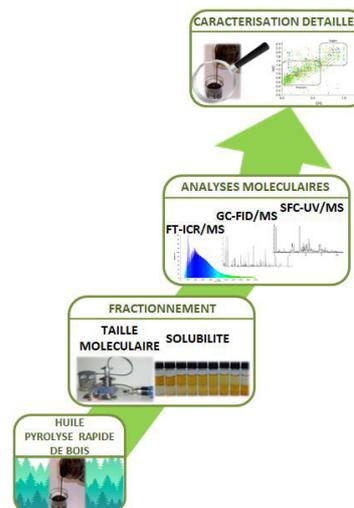
IFPEN propose une diversité de procédés et de catalyseurs pour la production de biocarburants et de molécules biosourcées. Pour alimenter cette offre, il est nécessaire de caractériser les propriétés physico-chimiques clés des différents produits liquides obtenus à partir de la biomasse lignocellulosique (matrices oxygénées). Cela est réalisé au travers de descripteurs pertinents qui ont fait l'objet de mon mémoire d'HDR et de plusieurs thèses que j'ai encadrées.

Les travaux qui ont abouti à ces descripteurs ont été réalisés grâce à une mutualisation des efforts de plusieurs directions d'IFPEN, en partenariat avec des acteurs extérieurs<sup>a</sup>.

Une approche multitechnique a été mise au point et adaptée selon la matrice à caractériser, afin de prendre en compte la large diversité des composés oxygénés en termes de fonctions chimiques, polarités, masses moléculaires et concentrations. Les méthodes analytiques développées dans ce but associent des chromatographies – en phase gazeuse (GC, GCxGC), supercritique ou liquide – ainsi que des techniques de spectroscopie et de spectrométrie

de masse de haute résolution. Une étape préalable de fractionnement des matrices est souvent réalisée en amont de l'analyse, par volatilité (micro-distillation), taille moléculaire (nano-filtration, chromatographie d'exclusion stérique) ou solubilité (chromatographie de partage centrifuge). Les huiles de pyrolyse rapide, à partir de bois de conifères, sont le premier cas d'application de cette méthodologie<sup>[1,2]</sup> qui a permis de prendre en compte la thermo-sensibilité, la forte polarité et/ou les hautes masses moléculaires des espèces oxygénées, pour aboutir à une caractérisation détaillée inédite (figure).

À l'origine orientée sur les produits issus de la transformation thermo-chimique (hydroliquéfaction, liquéfaction hydrothermale, pyrolyse rapide) de la biomasse lignocellulosique ou de la lignine, cette stratégie analytique s'est désormais élargie à de nouvelles matrices provenant de leur transformation par voie biochimique. ■



Méthodologie déployée pour l'analyse physico-chimique d'un liquide biosourcé.

[1] A. Dubuis, A. Le Masle, L. Chahen, E. Destandau, N. Charon, *J. Chrom. A* 1609 (2020) <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460505>

[2] A. Dubuis, A. Le Masle, L. Chahen, E. Destandau, N. Charon, *J. Chrom. A* 1597 (2019) <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.03.031>

Contact scientifique :  
nadege.charon@ifpen.fr

a - ESPCI, ICMCB, ICOA, IRCELyon, ISA

## Actualités

• Par décret pris en Conseil des ministres du 27 mai 2020, **Pierre-Franck Chevet est nommé Président du Conseil d'administration d'IFPEN** à compter du 2 juin. Il succède à Didier Houssin dont le mandat arrivait à échéance.

• Le rapport d'évaluation d'IFPEN par le HCERES a été publié. Il relève notamment la pertinence de son modèle économique centré sur l'innovation et une recherche fondamentale qualitative et bien structurée.

• IFPEN a adhéré au pôle de compétitivité Capenergies qui encourage les projets privés et publics-privés de recherche collaborative en matière d'énergie non génératrice de gaz à effet de serre.

## Récompense

• **Antoine Daudin**, chercheur à la direction Catalyse, Biocatalyse et Séparation est co-lauréat du Prix Jeune Chercheur 2020 de la DivCat avec Damien Debecker, Professeur à l'Université catholique de Louvain-la-Neuve (Belgique).

## Nomination

• **Florence Delprat-Jannaud**, responsable de programme au Centre de résultats Ressources énergétiques, a été élue Présidente du Club CO<sub>2</sub> pour trois ans.

## Publication

La brochure IFPEN Fundamental Research mise à jour est disponible sur le site [www.ifpen.fr](http://www.ifpen.fr).

## Web events\* scientifiques

• **Workshop Scienc'Innov Corrosion-LCE**, 3-4 novembre 2020 – [www.Corrosion-LCE.com](http://www.Corrosion-LCE.com)

\* Modification du format des événements en raison de la pandémie Covid-19

Directeur de la publication :

Jean-Christophe Flèche

Rédacteur en chef : Olga Vizika-Kawadias

Comité éditorial : Xavier Longaygue,

Laurent Forti, Catherine Ponsot-Jacquin

Conception graphique : Esquif

N° ISSN : 1957-3537

Contacts :

Direction scientifique : Tél. : +33 1 47 52 51 37 - [Science@ifpen.fr](mailto:Science@ifpen.fr)

Presse : A.-L. de Maignan - Tél. : 01 47 52 62 07

1 et 4, avenue de Bois-Préau - 92852 Rueil-Malmaison Cedex - France

Science@ifpen Numéro 41 • Juin 2020

[www.ifpenouvelles.fr](http://www.ifpenouvelles.fr) @IFPENinnovation

**ifp** Energies nouvelles