



# Science@ifpen

N° 43 - Décembre 2020

**NUMÉRO SPÉCIAL**  
Publications de  
jeunes docteurs



Pour IFPEN, acteur majeur de la recherche et de la formation, l'accueil des doctorants est une mission essentielle. Ces jeunes chercheurs en devenir apportent à notre

recherche fondamentale leur dynamisme, leur vision neuve et leur compétence. Ils bénéficient en retour d'un environnement de haut niveau et d'une ouverture sur des enjeux et des problématiques concrètes qui les préparent à leur activité future.

Nos doctorant(e)s sont également au cœur de nos collaborations avec le monde académique français et international. Ces collaborations sont essentielles pour lever les verrous scientifiques inhérents au développement de nos innovations et confronter notre recherche aux meilleures équipes. Nos doctorant(e)s sont d'ailleurs régulièrement primé(e)s, signe de la qualité de leurs travaux.

L'exigence et l'excellence scientifiques doivent être entretenues et reconnues, et c'est tout l'objet du prix Yves Chauvin auquel candidatent chaque année de jeunes docteur(e)s sélectionné(e)s par la direction de recherche qui les a accueilli(e)s. Je vous encourage à découvrir dans ce numéro les sujets soumis cette année à la sélection du Conseil scientifique, à commencer par les deux lauréats ex aequo : Rémi Hocq et Jérôme Rey.

Bonne lecture,

Pierre-Franck Chevet,  
Président d'IFP Energies nouvelles

## Optimisation d'un micro-organisme d'intérêt pour la bioproduction d'isopropanol et de n-butanol

Thèse de Rémi Hocq\*, co-lauréat du prix Yves Chauvin 2020

La substitution de bioprocédés aux procédés pétrochimiques requiert la mise en œuvre de biocatalyseurs (ou micro-organismes) pour produire des molécules, avec un moindre impact environnemental. L'un de ces micro-organismes, *Clostridium beijerinckii* DSM 6423, est capable de transformer, par fermentation, une grande variété de sucres en bioalcools valorisables directement ou déshydratés en propylène et butènes. Cependant, ses trop faibles productivités limitent encore son utilisation à l'échelle industrielle.

La recherche s'est d'abord concentrée sur l'étude des performances fermentaires en présence de coproduits de l'industrie sucrière (mélasses). Ceci a consisté à stabiliser des états physiologiques en culture continue, puis à les caractériser au travers d'une approche *in silico*<sup>a</sup>. Par la suite, l'utilisation couplée des derniers outils d'analyses omiques<sup>b</sup>, sondant l'ADN, l'ARN et les protéines de *C. beijerinckii*, a abouti à l'obtention de données fondamentales permettant d'appréhender son métabolisme et constituant une base de travail robuste et indispensable en vue de son exploitation. Enfin, pour optimiser ses capacités, un verrou majeur a été levé en concevant un premier outil de modification génétique<sup>c</sup>, puis en l'utilisant pour caractériser la protéine sigma 54, facteur essentiel de la production d'alcools dans ce micro-organisme<sup>[1-2]</sup>.

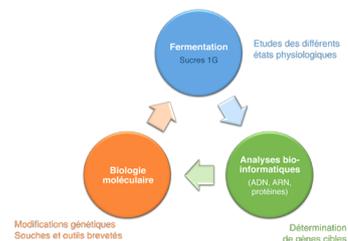


Schéma bilan de la démarche suivie.

Ainsi, par la création et la protection intellectuelle d'une première souche « plateforme », ce travail a ouvert la voie vers l'optimisation des performances fermentaires de ce micro-organisme d'intérêt industriel. ■

- a - Au moyen de calculs complexes informatisés ou de modèles informatiques
- b - Analyses à l'échelle moléculaire de l'ADN (génomique), de l'ARN (transcriptomique) et des protéines (protéomique)
- c - Basé sur la technologie CRISPR-Cas9

\*Thèse intitulée « *Clostridium beijerinckii* DSM 6423, une souche plateforme émergente pour la bioproduction de solvants »

[1] R. Hocq, M. Bouilloux-Lafont, N. Lopes Ferreira, F. Wasels. *Sci Rep.* 2019 ; 9(1):7228. DOI : 10.1038/s41598-019-43822-2

[2] M. Diallo, R. Hocq, F. Collasa, G. Chartier, F. Wasels, H. Surya Wijayaa, M.W.T. Werte, E.J.H. Wolberta, S.W.M. Kengen, J. der Oost, N. Lopes Ferreira, A.M. López-Contreras. *Methods.* 2020 ; 172:51-60. DOI : 10.1016/j.jymeth.2019.07.022

Contact scientifique :  
francois.wasels@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.

# Prétraitement et déformulation de produits issus de la biomasse

Thèse d'Alexis Dubuis\*

La mise au point de procédés de production de carburant et de molécules plateformes<sup>a</sup> à partir de biomasses lignocellulosiques requiert une connaissance de la composition chimique, à l'échelle moléculaire, des différents produits liquides générés. Or, la complexité de ces derniers rend nécessaire une étape de « déformulation » en amont de l'analyse proprement dite, sans occasionner de perte ni de modification des composés présents.

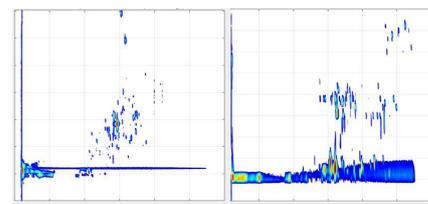
Ces travaux de thèse ont porté sur deux voies de fractionnement originales fondées, d'une part, sur la solubilité, avec des techniques d'extraction liquide-liquide (LLE) et de chromatographie de partage centrifuge (CPC) et, d'autre part, par taille moléculaire avec la chromatographie d'exclusion stérique (SEC). La LLE et la CPC permettent une extraction sélective de sucres, de composés neutres (furanes, aldéhydes, cétones, alcools, esters), d'acides carboxyliques et de phénols<sup>(1-2)</sup> tandis que la SEC assure une séparation plus spécifique des sucres<sup>(3)</sup>. L'analyse proprement dite a ensuite été effectuée

sur chaque fraction obtenue, par chromatographie liquide à polarité de phase inversée, avec une détection par ultraviolet et spectrométrie de masse (RPLC-UV/MS).

Les étapes de prétraitement et de déformulation permettent non seulement une simplification des échantillons à analyser mais également une structuration par propriétés des chromatogrammes générés, facilitant ainsi leur exploitation. En effet, les cartographies 2D inédites obtenues sont très riches en informations sur la composition chimique des bioproduits (figure). Pour affiner encore la caractérisation, cette méthodologie pourra être couplée avec un traitement chimiométrique des données. ■

a - Molécules utilisées comme base à de nombreuses applications

\*Thèse intitulée « Déformulation de matrices complexes issues de la biomasse et caractérisation par chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse »



Cartographies SECxRPLC/MS (gauche) et CPCxRPLC/MS (droite) obtenues pour un produit issu de la conversion par voie biochimique d'une paille de blé.

[1] C. Reymond, A. Dubuis, A. Le Masle, C. Colas, L. Chahen, E. Destandau, N. Charon, *Journal of Chromatography A* (2020), 1610. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460569>

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

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

Contact scientifique :  
agnes.le-masle@ifpen.fr

## Simulations d'écoulements diphasiques : tous les régimes sont désormais accessibles

Thèse de Songzhi Yang\*

Le domaine de l'injection moteur, comme de nombreuses applications nécessitant le recours à la simulation numérique, fait intervenir des écoulements diphasiques complexes. Or, la plupart des logiciels de calcul en mécanique des fluides peuvent simuler des écoulements à une phase (liquide ou gaz), éventuellement en régime supercritique<sup>a</sup>, ou bien des écoulements diphasiques (liquide-gaz) en régime sous-critique.

Ce travail propose une modélisation complète pour simuler ces deux cas, y compris le régime transcritique<sup>b</sup>, ainsi que l'éventuelle transition de phase (évaporation ou condensation). Pour cela, un modèle d'écoulement diphasique totalement compressible et à interface diffuse a été développé, basé sur une approche eulérienne-eulérienne<sup>c</sup> de fluides réels supposant un équilibre liquide-vapeur<sup>(1)</sup>. Il a rendu possible la simulation de l'injection transcritique dans l'injecteur de référence Spray A du réseau ECN<sup>d</sup> (2). Il s'est aussi avéré capable de prévoir le phénomène de cavitation<sup>e</sup> dans une buse tridimensionnelle, soulignant

ainsi l'importance de la prise en compte des gaz dissous dans la modélisation de l'injection<sup>(3)</sup>. En particulier, son utilisation a apporté un nouvel éclairage sur le phénomène de nucléation des bulles, en fonction de la quantité du gaz non condensable dissous.

De nombreuses autres applications faisant intervenir des écoulements diphasiques complexes pourront désormais être simulées avec davantage de réalisme, telles que les turbines à gaz et les moteurs-fusées cryogéniques, ou bien l'ébullition de liquide de refroidissement pour l'électronique de puissance de moteurs électriques ou de centres de calculs. ■

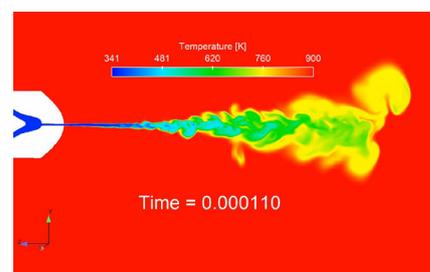
a - État d'un corps pur lorsque sa pression  $P > P_c$  ou bien sa température  $T > T_c$ . Dans le cas contraire, il est dans un état sous-critique

b - Condition générée lorsqu'un fluide sous-critique est injecté dans un fluide supercritique

c - Approche eulérienne à la fois pour le liquide et le gaz

d - Engine Combustion Network (<https://ecn.sandia.gov/workshop/ECN1/intro.pdf>)

e - Formation de bulles de gaz ou de vapeur dans un liquide soumis à une dépression



Simulation d'injection transcritique sur l'injecteur Spray-A (champs de température à 112  $\mu$ s).

\*Thèse intitulée "Modeling of Diesel injection in subcritical and supercritical conditions"

[1] P. Yi, S. Yang, C. Habchi, R. Lugo, 2019. *Phys. Fluids* 31, 026102. <https://doi.org/10.1063/1.5065781>

[2] S. Yang, P. Yi, C. Habchi, 2020. *Int. J. Multiph. Flow* 103145. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.103145>

[3] S. Yang, C. Habchi, 2020. *Phys. Fluids* 32, 032102. <https://doi.org/10.1063/1.5140981>

Contact scientifique :  
chawki.habchi@ifpen.fr

# La nanoparticule métallique en équilibre sur une arête

Thèse d'Ana Teresa Fialho Batista\*

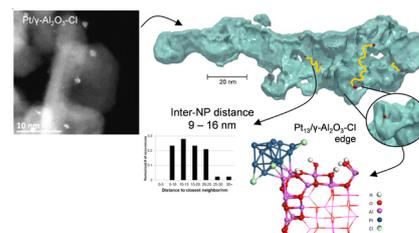
Les nanoparticules de platine supportées sur alumine- $\gamma$  chlorée sont utilisées dans les catalyseurs hétérogènes bifonctionnels<sup>a</sup> qui sont au cœur de nombreux procédés industriels. La localisation des deux types de sites renferment ces catalyseurs et la distance entre ces sites, paramètres critiques pour les performances, ont été déterminées grâce à une étude à l'échelle atomique en faisant varier différents paramètres physico-chimiques.

Pour cela, une approche multitechnique combinant synthèse, caractérisation avancée et modélisation (figure) a été mise en œuvre impliquant plusieurs directions de recherche d'IFPEN et des laboratoires partenaires : IPCMS, CRMN, ESRF<sup>b</sup> et Institut Néel.

Des analyses HR-HAADF-STEM<sup>c</sup> ont permis de révéler que des particules de Pt sub-nanométriques et des atomes uniques de Pt sont présents sur l'alumine<sup>(1)</sup>. De plus, la tomographie électronique a montré que la majorité des nanoparticules de Pt sont localisées sur les arêtes des plaquettes du support

alumine. Ce résultat original entre en résonance avec les analyses RMN et DFT<sup>d</sup> qui ont montré que le chlore est aussi stabilisé sur les arêtes<sup>(2)</sup>. Enfin, une analyse mathématique et un modèle géométrique de catalyseur ont permis d'estimer les distances moyennes intersites.

Ces nouvelles connaissances ouvrent de nouvelles voies rationnelles d'amélioration des performances des catalyseurs, au travers de méthodes de préparation orientant vers un meilleur contrôle des sites actifs à l'échelle atomique. ■



Moyens d'étude employés : cliché STEM, mesure tomographique et modélisation moléculaire quantitative.

- a - Comportant des sites actifs métalliques et des sites acides
- b - Institut de physique et chimie des matériaux de Strasbourg ; Centre de RMN à très hauts champs de Lyon ; European Synchrotron Radiation Facility
- c - High Resolution - High Annular Angle Dark Field - Scanning Transmission Electron Microscopy
- d - Nuclear Magnetic Resonance et Density Functional Theory

[1] A.T.F. Batista, W. Baaziz, A.-L. Taleb, J. Chanot, M. Moreaud, C. Legens, A. Aguilar-Tapia, O. Proux, J.-L. Hazemann, F. Diehl, C. Chizzallet, A.-S. Gay, O. Ersen, P. Raybaud, ACS Catal. 2020, 10, 7, 4193-4204. <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c00042>

[2] A.T.F. Batista, D. Wisser, T. Pigeon, D. Gajan, F. Diehl, M. Rivallan, L. Catita, A.-S. Gay, A. Lesage, C. Chizzallet, P. Raybaud, J. Catal. Priority Communication 2019, 378, 140-143. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.08.009>

\*Thèse intitulée "Atomic scale insight into platinum based catalysts supported on chlorinated gamma-alumina"

Contact scientifique : ana-teresa.fialho-batista@ifpen.fr

# Des flux dynamiques pour de meilleures stratégies bas carbone

Thèse d'Ariane Albers\*

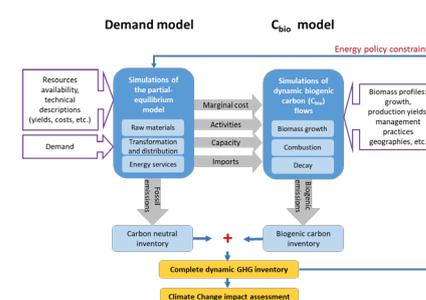
Les stratégies bas carbone favorisent l'utilisation de sources d'énergie renouvelable provenant entre autres de la biomasse. L'objectif d'atteindre la neutralité carbone s'y exprime au travers d'une compensation entre émissions et captations du CO<sub>2</sub>. Les émissions impactant le climat sont analysées *via* des méthodologies dédiées, comme l'analyse du cycle de vie (ACV). Cependant les modèles utilisés dans ces approches sont statiques car ils représentent uniquement les systèmes dans un état d'équilibre. Or, l'intégration de la dimension temporelle, en distribuant les flux de carbone biogénique (C<sub>bio</sub>)<sup>a</sup> au cours du temps, pourrait remettre en cause ces stratégies bas carbone.

C'est la question à laquelle s'est attaché ce travail de thèse, en développant des outils pour décrire des flux de C<sub>bio</sub> dynamiques et pour les coupler à différents modèles de demande (figure). L'écart entre les résultats issus des nouvelles évaluations dynamiques et ceux provenant des

approches statiques habituelles a ensuite été analysé<sup>(1-2)</sup>. Ceci a révélé que la nouvelle modélisation de la séquestration du C<sub>bio</sub> et de la dynamique du COS<sup>b</sup> fournissait une représentation plus précise des flux de C<sub>bio</sub> et que son intégration dans les modèles de changement climatique impactait significativement leurs prévisions.

Cette avancée méthodologique, au service des ACV, est particulièrement intéressante dans la perspective des actions à mettre en œuvre face aux enjeux climatiques. ■

- a - Carbone de la biosphère terrestre
- b - Carbone organique du sol



Couplage d'un modèle de prospective énergétique avec un modèle de croissance de biomasse forestière.

[1] A. Albers, P. Collet, D. Lorne, A. Benoist, A. Hélias (2019a). Applied Energy 239, 316-330. DOI : 10.1016/j.apenergy.2019.01.186

[2] A. Albers, A. Avadi, A. Benoist, P. Collet, A. Hélias (2019c). Science of The Total Environment, 135278. DOI : 10.1016/j.scitotenv.2019.135278

Contact scientifique : pierre.collet@ifpen.fr

# La dynamique réactionnelle dans les zéolithes à la loupe du calcul quantique

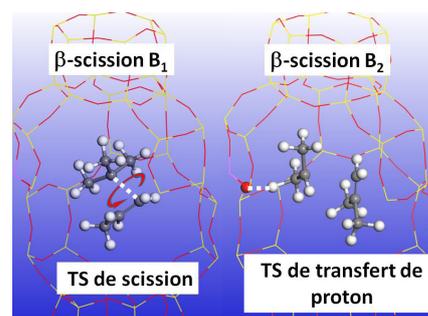
Thèse de Jérôme Rey\*, co-lauréat du prix Yves Chauvin 2020

Les zéolithes sont des solides nanoporeux largement utilisés comme catalyseurs acides de transformation de molécules hydrocarbonées. Déterminer les vitesses des actes élémentaires des mécanismes réactionnels constitue toutefois un défi, en raison du grand nombre de degrés de liberté dont disposent les réactifs, les intermédiaires<sup>a</sup> et les états de transition<sup>b</sup> dans la cavité zéolithique. Ce défi a été relevé grâce à la puissance du calcul quantique.

En collaboration avec l'université Comenius de Bratislava, nous avons employé la dynamique moléculaire *ab initio* (AIMD)<sup>c</sup> contrainte<sup>d</sup> pour modéliser avec précision les réactions d'isomérisation et de craquage d'alcènes, et quantifier leurs constantes de vitesse. Il s'est alors avéré que l'AIMD surpassait les méthodes statiques conventionnelles pour ces réactions.

Il a ainsi été possible d'identifier les intermédiaires réactionnels impliqués, ainsi que les états de transition clés (figure) pour les réactions d'isomérisation d'alcènes *via* des carbocations<sup>e</sup> tertiaires<sup>(1)</sup> et secondaires<sup>(2)</sup>, et pour leur craquage par  $\beta$ -scission<sup>(3)</sup>.

Ces éléments inédits de compréhension des mécanismes à l'œuvre s'accompagnent d'une quantification fine des constantes de vitesse associées, qui dépendent directement de la différence d'énergie libre entre états de transition et intermédiaires. Celles-ci seront introduites dans des modèles cinétiques pour prédire les performances catalytiques des zéolithes à l'échelle macroscopique, en raffinage pétrolier et en transformation de la biomasse. ■



États de transition (TS) déterminés par AIMD pour le craquage d'alcènes à 7 atomes de carbone dans la zéolithe chabazite.

- a - Produits formés puis retransformés au cours des étapes de réaction
- b - États théoriquement présents dans le schéma réactionnel mais non observés concrètement
- c - *Ab initio molecular dynamics*
- d - Permettant d'orienter l'évolution du système selon une voie réactionnelle donnée
- e - Ion dérivé d'un composé organique, avec une charge électrique positive sur un ou plusieurs atomes de carbone

[1] J. Rey, A. Gomez, P. Raybaud, C. Chizallet, T. Bučko, *J. Catal.*, 373, 361–373, 2019.  
<https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.04.014>

[2] J. Rey, P. Raybaud, C. Chizallet, T. Bučko, *ACS Catalysis*, 9, 9813–9828, 2019.  
<https://doi.org/10.1021/acscatal.9b02856>

[3] J. Rey, C. Bignaud, P. Raybaud, T. Bučko, C. Chizallet, *Angew. Chem., Int. Ed.*, Vol. 59, Issue 43, October 2020.  
<https://doi.org/10.1002/anie.202006065>

\*Thèse intitulée « Mécanismes et cinétique de l'isomérisation et du craquage d'alcènes dans la zéolithe chabazite quantifiés par dynamique moléculaire *ab initio* contrainte »

Contact scientifique :  
celine.chizallet@ifpen.fr

## Actualités

• **Gabriele Fioni**, recteur délégué pour l'enseignement supérieur, la recherche et l'innovation de la région académique Auvergne-Rhône-Alpes a visité IFPEN-Lyon où lui ont été présentés nos travaux dans les domaines de la mobilité durable et des énergies nouvelles.

• Retour sur les avancées du laboratoire commun de recherche CARMEN avec **une interview-synthèse de Nathalie Schildknecht** (<https://www.ifpenergiesnouvelles.fr/article/lcr-carmen-belle-annee-demarrage>)

• **Antoine Fécant**, de la direction Catalyse, Biocatalyse et Séparation, est intervenu à l'Académie des Sciences, Belles-Lettres et Arts de Lyon. Son intervention a porté sur une description des risques de dérèglements climatiques liés aux activités humaines et notamment aux émissions massives de CO<sub>2</sub>.

## Événement scientifique

• 31<sup>e</sup> symposium sur la thermodynamique appliquée ESAT, 4-7 juillet 2021 - [www.esat2021.com](http://www.esat2021.com)

## Récompenses

• **Violaine Lamoureux-Var**, de la direction Géosciences, a reçu le 1<sup>er</sup> prix ex-aequo FIEEC Carnot de la Recherche appliquée 2020 pour l'équipement Rock-Eval<sup>®</sup> 7S, technologie de caractérisation géochimique d'échantillons de roches.

• **Antoine Daudin**, de la direction Catalyse, Biocatalyse et Séparation, est co-lauréat du Prix Jeune Chercheur 2020 de la DivCat de la Société chimique de France pour sa contribution importante à l'étude et au développement de catalyseurs hétérogènes et d'adsorbants à base de sulfures de métaux.

• Le prix de thèse Innovation de l'Interdivision Énergie de la Société chimique de France a été décerné à **Alexis Dubuis**, par ailleurs candidat au prix Yves Chauvin (cf. la brève dans ce numéro).

## Publications

• La brochure, en anglais, sur la recherche fondamentale au service de l'innovation à IFPEN vient d'être mise à jour.

• Relance de la collection des « Cahiers de l'Économie » dans un format numérique. Elle a pour objectif de présenter les travaux traitant d'économie, de finance ou de gestion de la transition énergétique, réalisés par la direction Économie et Veille et IFP School.

• Parution sur le site web d'IFPEN d'un article consacré au cobalt, métal stratégique dans ses travaux, dans le cadre de l'évolution de la géopolitique de l'énergie dans le contexte de la transition énergétique bas carbone.

Directeur de la publication :

Jean-Christophe Flèche

Rédacteur en chef : Olga Vizika-Kawwadias

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 Marignan - Tél. : 01 47 52 62 07

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

Science@ifpen Numéro 43 • Décembre 2020

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

**ifp** Energies nouvelles

# Détection à moindre coût des particules de suie ultrafines à l'échappement des moteurs

Thèse d'Adrien Reynaud\*

Pour des raisons sanitaires, les émissions de particules fines produites par les moteurs thermiques sont réglementées par l'Union européenne depuis les années 90. Afin de respecter ces normes, des filtres à particules sont implantés sur les lignes d'échappement des véhicules concernés. Pour contrôler leur bon fonctionnement, les capteurs résistifs, à la fois robustes et peu onéreux, sont d'excellents candidats. Ce type de capteur repose sur la mesure de la conductance d'un dépôt de particules, formant comme un pont entre deux électrodes (figure). Il ne permet aujourd'hui que d'estimer une concentration en masse par unité de volume. Or, les normes réglementent aussi la concentration en nombre qui est un meilleur indicateur de l'effet néfaste des particules sur la santé, en prenant mieux en compte les particules ultrafines.

Comme préalable au développement d'un capteur sensible au nombre, ce travail de thèse a cherché à mieux comprendre les mécanismes de dépôt des particules dont les plus fines. Celles contenues dans les gaz d'échappement ont tout d'abord été classifiées en fonction de leur taille, grâce à deux techniques expérimentales<sup>a</sup>, pour n'envoyer sur le capteur que les plus fines d'entre elles. Ceci a permis de montrer que la construction des ponts

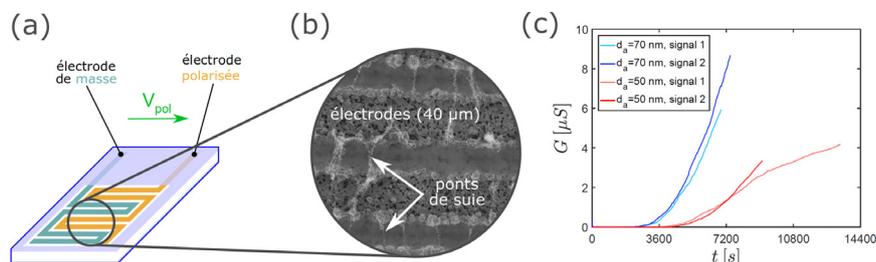


Schéma du capteur (a), micrographie MEB des ponts (b) et signaux pour différents diamètres de particules (c).

se produisait aussi avec des particules ultrafines (50 nm)<sup>[1]</sup>.

Une analyse par simulation numérique a ensuite mis en lumière un phénomène physique jusqu'alors absent de la littérature du domaine, la diélectrophorèse, qui permet de mieux expliquer les mécanismes de construction des microstructures des suies en fonction de la taille des particules et dont le principe pourrait en outre servir à mettre au point un capteur sensible aux particules les plus fines.

Ces résultats constituent une avancée importante pour mieux exploiter le signal des capteurs résistifs, en vue d'obtenir des informations sur la concentration en nombre des particules de suie ultrafines. ■

a - La classification électrostatique et la classification aérodynamique

[1] A. Reynaud, M. Leblanc, S. Zinola, P. Breuil, J.-P. Viricelle, 2019, *Sensors* 19. DOI : 10.3390/s19030705

\*Thèse intitulée « Compréhension et modélisation des mécanismes de captation des aérosols par couplage des phénomènes aérodynamiques et électriques »

Contact scientifique : stephane.zinola@ifpen.fr

www.esat2021.com



ESAT2021@ifpen.fr

4-7 July 2021

31<sup>st</sup> European Symposium  
on Applied Thermodynamics  
Paris - France



Co-organized by



# Un nouvel outil numérique pour simuler l'interaction des parcs éoliens et de la météorologie locale

Thèse de Pierre-Antoine Joulin\*

La Programmation pluriannuelle de l'énergie encourage l'essor de l'énergie éolienne. Pour prévoir cette production énergétique et tenter de l'optimiser, quelle que soit l'implantation (mer, montagne), une meilleure compréhension de l'écoulement du vent au sein des parcs éoliens sera nécessaire. C'est notamment vrai pour les éoliennes offshore qui, de par leur taille, vont interagir plus fortement avec l'atmosphère et avec la météorologie locale. Caractériser ces interactions, à la fois pluridisciplinaires (aérodynamiques et météorologiques) et multi-échelles (de la pale à l'atmosphère) constitue, par conséquent, un enjeu industriel et environnemental.

Un outil numérique dédié à cette problématique a été développé dans le cadre de cette thèse, en partenariat avec Météo France. Il permet de simuler le comportement des éoliennes au sein d'une couche limite atmosphérique réaliste. Le logiciel propose un couplage entre des modèles aérodynamiques d'éoliennes et Meso-NH, le modèle météorologique à maille fine développé par le Centre national de recherches météorologiques et le Laboratoire d'aérodynamique. Les travaux réalisés se sont également attachés à valider les résultats des calculs par confrontation à des cas expérimentaux<sup>(1)</sup>.

La capacité à reproduire des états atmosphériques complexes a été récemment démontrée<sup>(2)</sup> au travers du cas de la formation nuageuse du parc offshore danois de Horns Rev 1, laquelle n'avait jusqu'alors jamais été reproduite avec autant de détails (figure).

La modélisation hautement réaliste de ce nouvel outil numérique, bientôt *open source*, élargit le champ des possibles pour la simulation des parcs éoliens. Il est d'ores et déjà utilisé par IFPEN pour calibrer les modèles d'optimisation d'agencement des éoliennes ainsi que pour étudier les interactions entre les parcs et la météorologie locale. ■



A. Parc de Horns Rev (Vattenfall ; Photo : Christian Steiness)  
B. Simulation numérique<sup>(2)</sup>

(1) P.-A. Joulin, M.-L. Mayol, F. Blondel, V. Masson, Q. Rodier, C. Lac. (2019, July). *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1256, No. 1, p. 012019). IOP Publishing.  
DOI : 10.1088/1742-6596/1256/1/012019

(2) P.-A. Joulin, M.-L. Mayol, V. Masson, F. Blondel, Q. Rodier, M. Cathelain, C. Lac. (2020). *Frontiers in Earth Science*, 7, 350.  
DOI : 10.3389/feart.2019.00350

\*Thèse intitulée « Modélisation à fine échelle des interactions entre parcs éoliens et météorologie locale »

Contact scientifique : pierre-antoine.joulin@ifpen.fr

**Fundamental Research**

ifp Energies nouvelles

Geosciences  
Chemical sciences  
Analysis and characterization  
Physical sciences  
Physical chemistry  
Biosciences and biotechnologies  
Engineering sciences  
Mathematics and IT  
Economics



Serving innovation for the energy transition

30% of IFPEN's R&D activities dedicated to fundamental research

- A program structured around 9 cross-functional scientific challenges
- More than 300 ongoing academic collaborations around the world
- Recruitment of more than 200 PhDs and 80 postdocs in the last 5 years



En savoir plus :

[www.ifpennergiesnouvelles.fr/recherche-fondamentale](http://www.ifpennergiesnouvelles.fr/recherche-fondamentale)