**Feuille de route**

**Sciences de base pour l’Energie**

***Simulations multi-échelles : de la molécule aux systèmes en fonctionnement***



**Sciences de base pour l’Energie :**

**Simulations multi-échelles : de la molécule aux systèmes en fonctionnement**

1. **Structurer la communauté de l’énergie vers le HPC**

Les codes utilisés sur des milliers voire millions de cœurs de calcul sont devenus trop complexes, et nécessitent des compétences n’entrant pas directement dans le champ des compétences des chercheurs dans le domaine de l’énergie.

Il est en particulier nécessaire de :

* Former les chercheurs et étudiants pour utiliser efficacement les machines de calcul modernes, massivement parallèles,
* Partager les codes de calculs utiles au domaine l’énergie afin d’optimiser l’effort et partager la compétence dans le développement de codes dédiés.
* Mettre en contact les spécialistes en mathématiques appliqués, algorithmique, informatique, méthodes stochastique avec la communauté de l’Energie.
* Permettre de coupler les codes de manière formelle (simulation multiphysique couplée) en développant des middlewares adaptés
* Accentuer les efforts dans le transfert de l’information entre les différentes échelles spatiales et temporelles
* Introduire les méthodes de l’Intelligence Artificielle, non seulement pour analyser les données, mais aussi pour construire des modèles voire prédire le comportement des systèmes

Pour cela il est nécessaire de veiller à intégrer, **sous la forme d’un réseau**, toutes les communautés concernées par le développement de codes sur des problèmes fondamentaux communs à plusieurs domaines et qui permettront de nourrir le champ de l’énergie.

***Moyens :*** *Inclure cette thématique dans le groupe de travail ALLISTEN-ANCRE*

1. **Renforcer les apports des approches théoriques au champ de l’énergie[[1]](#footnote-1)**

Un grand nombre de problèmes d’ingénierie en lien la conversion de l’énergie, son stockage et sa distribution nécessite la prise en compte de propriétés physiques aux échelles voisines de celle de l’atome.

Les méthodes *ab initio* participent à la détermination de la structure électronique des matériaux par des calculs atomistiques. Les progrès réalisés à la fois sur le plan théorique et dans le domaine du calcul scientifique haute performance (massivement parallèle) permettent d’envisager à moyen terme l’utilisation de ces méthodes afin d’optimiser certaines propriétés fonctionnelles utiles au domaine de l’énergie : band-gap des semi-conducteurs, supraconductivité, effets thermoélectriques, magnétocalorique, propriétés de transport de la chaleur, des charges électriques …

Les méthodes issues de type dynamique moléculaire permettent de décrire l’état liquide, ce qui est d’une importance toute particulière en électrochimie pour décrire et modéliser les processus rencontrés par exemple dans les batteries, les super-condensateurs, les piles à combustibles, électrolyseurs, aux interfaces liquide/solide.

L’exploitation des méthodes *ab initio* ou issues de la mécanique statistique doit être construite dans une logique intégrative permettant : i) un développement théorique de ces méthodes pour des objets utiles au domaine de l’énergie ; ii) l’exploitation de ces données générées *ab initio* (échelle atomique) ou à l’échelle moléculaire et iii) les méthodes de propagation des propriétés obtenues à l’échelle atomique vers la méso-échelle et aux échelles utiles à l’ingénieur.

1. ***Méthodes ab initio***

La DFT est actuellement la méthode de référence, notamment l’état solide, qui permet de rendre compte de manière satisfaisante des propriétés de la plupart des matériaux dits faiblement corrélés, c'est à dire pour lesquels les corrélations entre électrons sont faibles.

Pour les matériaux fortement corrélés, la DFT peut être mise en défaut.

L’objectif sera de développer de nouvelles théories *ab initio* (dont les méthodes stochastiques) permettant de décrire correctement les propriétés des systèmes fortement corrélés, qui concernent de nombreux matériaux ou systèmes liés à l’énergie : supraconducteurs, aimants, matériaux à base d'actinides (matériaux pour le nucléaire), matériaux à base d'oxyde de métaux de transition (production ou le stockage de l'énergie), chimie réactive…

1. ***Mécanique statistique***

Les méthodes *ab initio* génèrent un grand nombre de données à l’échelle nanoscopique. Le passage à des échelles de taille supérieure, correspondant à différents états d’organisation de la matière doivent être développées ou adaptées.

Lors du passage à l’échelle supérieure qui est celle des comportements collectifs au niveau (méso)-(micro)scopique, on note également un besoin d'accroître les apports de la physique statistique.

Par ailleurs, des approches de mécanique statistique, prenant en compte les potentiel d’interaction entre les molécules, issus de simulations moléculaires (exemple des potentiels réactifs), devront permettre d’apporter des réflexions nouvelles sur la description de l’état fluide et des interactions entre fluides et solides et prenant en compte des couplages multiples : conduction électrique, thermique, mouillabilité, changements de phase, nanostructuration de l’état solide.

***Moyens****: appels à projets*

1. **Méthodes de changement d’échelle : du « nano » au continuum1**

Dans une simulation multiéchelle démarrant à l’échelle nanoscopique, un point essentiel est de définir les descripteurs pertinents à cette échelle qui soit ne seront définis qu’à l’échelle locale (potentiel de double couche par exemple) soit seront susceptibles d’avoir un sens aux échelles supérieures (valeurs d’équilibre qui garderont un sens à l’échelle macroscopique).

Des progrès doivent être faits dans une confrontation entre une description d’un milieu avec une périodicité spatiale ou stochastique. L’obtention d’une distribution des valeurs effectives macroscopiques en fonction des lois statistiques du milieu reste un défi à relever.

Si à l’échelle moléculaire, les potentiels d’interaction sont relativement bien connus, aux échelles mésoscopiques intermédiaires, typiquement entre le nanomètre et quelques microns, l’organisation de la matière n’est plus régie par des interactions dominantes. L’observation des milieux par différentes techniques d’imagerie (FIB, tomographie neutrons ou X, IRM…), le traitement d’images et l’obtention des propriétés effectives macroscopiques par des procédures adaptées de post-traitement (de manière déterministe ou statistique) doivent être développés.

La détermination des propriétés effectives d’un matériau est très souvent dépendante des « défauts » présents dans ce matériau, que cela soit en volume ou en surface au niveau des interfaces. Les méthodes qui seront développées s’attacheront à prendre en compte cet aspect.

***Moyens****: Un réseau temporaire et multidisciplinaire sur les méthodologies de changement d’échelle, afin de proposer des projets qui pourront être financés à l’issue du travail en réseau.*

1. **Méthodes de traitement des données massives**

Les méthodes *ab initio*, celles issues de la physique statistique ou des codes de calculs ainsi que les expériences génèrent des données massives. Il est donc nécessaire d’utiliser les méthodes familières aux « data scientists » (data-mining, benchmarkings numériques, traitements des incertitudes, text-mining), dans le domaine de l’énergie en identifiant des problématiques concrètes à partager avec cette communauté.

***Moyens****: Transposer le travail du groupe ANCRE-ALLISTEN sur ce point en appels à projets ou réseau thématique*

***Moyens :*** *Brokerage events par sous-thématique.*

1. **Domaines clés**
2. **Vieillissement, dégradations**

Les problèmes liés aux dégradations et au vieillissement concernent de nombreux domaines : corrosion des matériaux, dégradation sous irradiation (nucléaire), dégradation des systèmes électrochimiques, la formation de dépôts (ex- encrassement des échangeurs), évolution de la géométrie sous sollicitations couplées (nucléaire). Les cyclages, la fatigue thermomécanique, les réactions électrochimiques ou physicochimiques influencent ces processus à long terme. S’en suivent la problématique de l’estimation de la durée de vie et l’élaboration de plans de maintenances préventives, de fiabilité des composants et des systèmes.

Problématique concernée les dimensionnements (durée de vie, maintenance) sont globalement réalisés à partir de grandeurs moyennes et extrêmes. Il serait pertinent d’accéder à des grandeurs instantanées, qui peuvent être confrontées à des données d’observation expérimentales. Notamment, le rôle des régimes transitoires est fondamental dans la détermination de la durée de vie.

L’enjeu est donc de disposer de nouveaux outils de simulation prédictifs et instationnaires, couvrant en particulier des gammes d’échelle et de pas de temps très grandes : pas de temps de cinétiques réactionnelles, amorçage de défaut, germination, nucléation, sollicitations mécaniques instationnaires, régimes transitoires thermiques, phénomènes hors équilibre thermodynamiques pour aller jusqu’à la prévision de l’amplitude de la durée de vie du matériau ou du composant.

Les verrous à traiter sont de deux natures :

* Développement de simulation 4D multi-physiques, multiéchelles et adaptatives : par exemple simuler le transport réactif en milieux poreux ou hétérogènes en y intégrant la physique des phénomène de dégradation (ex-bétons ferraillés, assemblage membrane-électrode dans les piles à combustible, … ).
* Au-delà des simulations détaillées, l’extrapolation de la durée de vie, le pronostic ou encore l’élaboration de plans de maintenance préventive nécessite de développer des modèles réduits dont l’élaboration requiert des apports de méthodes mathématiques.
1. **Ingénierie catalytique**

Les problématiques liées à la catalyse et notamment la formulation de catalyseurs sont souvent traités de manière empirique : ainsi, apparait la nécessité de développer des outils de simulation qui permettront d’aider à la conception de catalyseurs et de sites catalytiques en prenant en compte :

- la structuration multi-échelle (catalyseur, son support, fluide en interaction),

- la cinétique réactionnelle associée : la sélectivité chimique, la détermination des chemins réactionnels, les processus à étapes multiples, l’identification des étapes cinétiquement limitantes et de leur nature, le lien entre micro-structure de la surface et réactivité chimique (par exemple lien entre défauts de surface et réactivité),

- l’ingénierie du site catalytique : stéréochimie, sites polynucléaires, gestion des transports de masse à l’échelle moléculaire), les techniques d’inhibitions de chemins réactionnels non-désirables.

Les verrous concernent les tailles de systèmes et le grand nombre de mécanismes significatifs impliqués aux petites échelles et aux échelles intermédiaires, pour traiter des situations modèles suffisamment proches de la réalité (voire réelles) comme le site triple dans les électrodes de piles à combustible ou bien la combinaison de mécanismes complexes comme tels que la production photocatalytique de combustibles solaires (solar fuels).En particulier, a question de l’environnement du (des) site(s) (photo)(électro) catalytique(s) et de son influence sur la réactivité et la sélectivité doit être traitée.

1. **Transport réactif en milieux poreux**

Les milieux poreux constituent par excellence un domaine complexe mêlant physique interfaciale, transport, réactions chimiques. Trois principaux verrous sont identifiés :

* Dans les simulations, la prise en compte de couplages entre chimie, physico-chimie (mouillage en particulier), effet de solvant, réactivités aux interfaces, surface et interconnectivité des pores, contraintes mécaniques aux interfaces.
* Identification des descripteurs pertinents à suivre à l’échelle du pore
* Prise en compte des défauts, des hétérogénéités

Les méthodes de changement d’échelle déjà évoquées précédemment trouveront un terrain d’application privilégié.

1. **Multimatériaux et interfaces complexes : conception rationnelles, propriétés et fabrications**

Les multi-matériaux complexes font partie intégrante de très nombreux systèmes énergétiques et mettent en jeu des interfaces complexes, solide-solide, solide-fluide : surfaces échangeuses de chaleur, électrodes (batteries, supercapacités), assemblages membrane-électrodes, ….

Le principal verrou concerne l’impact des interfaces sur les propriétés physico-chimiques, électrochimiques, mécaniques, réactionnelles, etc… qui doit pouvoir être prédit, tout en prenant en compte l’état de surface (subi ou fonctionnalisé) : celui-ci est en effet un déterminant pour de nombreux phénomènes liés à l’énergie, notamment les transferts de chaleurs aux interfaces solide-solide, les transferts de chaleurs, masse ou de charges électriques aux interfaces fluides-solides structurées à différentes échelles, … Ainsi, il sera essentiel d’introduire les propriétés interfaciales (y compris l’effet de solvant) dans la simulation (3D) des procédés de conception et de fabrication de multi-matériaux complexes et de leur comportement en service (effet de contraintes mécaniques, processus de solidification, par exemple).

1. **Simulation des systèmes et procédés**

De nombreux procédés comme ceux utilisés dans le traitement des déchets, le raffinage des hydrocarbures, le fonctionnement des batteries redox flow nécessite un fort degré d’agilité du fait de la variabilité des entrées et de l’hétérogénéité des systèmes mis en jeu, ou encore de la variabilité dans le temps de certains éléments. Signalons également la simulation de systèmes complets (moteurs automobiles, réacteurs aéronautiques, fours industriels,…). Ainsi ces procédés doivent pouvoir être rapidement reconfiguré en fonction des évolutions des entrées ou du système lui-même. Le principal verrou à lever est alors le développement de nouveaux modèles, de méthodes mathématiques (homogénéisation en particulier) et algorithmiques en capacité de simuler des procédés agiles, reconfigurables, aux entrées versatiles, aptes à gérer de nombreuses hétérogénéités et de nombreux défauts. Ceci nécessite de coupler différentes échelles de temps et d’espace tout en prenant en compte les aspects très souvent multiphasique du milieu, les interfaces complexes ainsi générées.

***Moyens :*** *appels à projets pour I à V*

1. *A rapprocher de Mission Innovation, Challenge 6 : Clean Energy Materials Innovation Challenge* [↑](#footnote-ref-1)