

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea

Département RadioChimie et Procédés



cfcam - Ile-De-France

Centre Français de Calcul
Atomique et Moléculaire

UPMC
SORBONNE UNIVERSITÉS

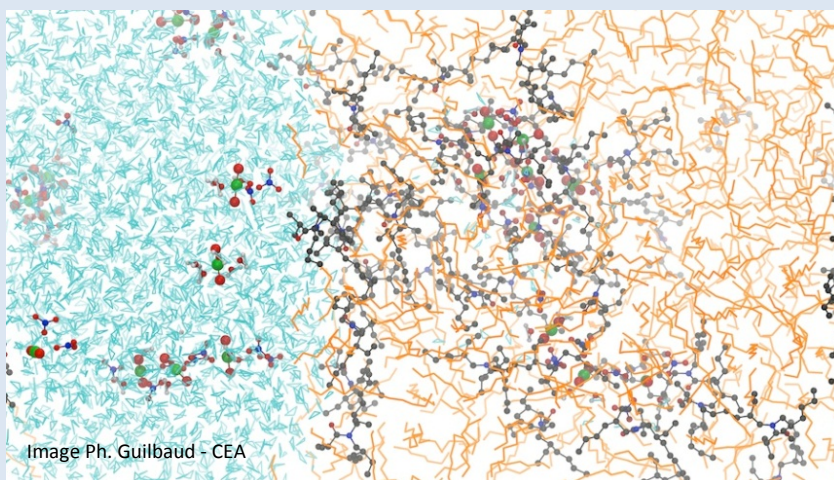
Séminaire

Modélisation multi-échelle

Applications aux procédés physico-chimiques

14 et 15 février 2013

Amphi Jean Perrin, 11 Rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris



Organisé par Pierre Turq
Christophe Poinssot
Stéphane Bourg
Jean-François Dufrêche

Contexte

L'importance de la chimie dans le cycle du combustible nucléaire, couplée au rôle de plus en plus déterminant de la modélisation/simulation dans le développement des procédés industriels, a conduit le CEA à lancer le développement d'une plateforme de simulation en chimie qui regroupera et mutualisera l'ensemble des outils de simulation. Cette plateforme a l'ambition d'intégrer les différentes échelles de modélisation « de l'atome au procédé » afin d'améliorer la robustesse de la simulation en approfondissant la phénoménologie.

Depuis une quinzaine d'années, la simulation a connu un essor spectaculaire grâce au développement d'architectures numériques performantes et de modèles physiques plus phénoménologiques permettant de décrire finement les mécanismes mis en jeu. Cela est particulièrement vrai dans le domaine de la physique et des matériaux.

En revanche, en chimie, les outils de simulation aux échelles procédés reposent encore pour l'essentiel sur un savoir-faire expérimental acquis par des décennies d'expériences dédiées. En tirant parti des méthodologies et du savoir-faire numérique acquis dans d'autres domaines scientifiques, la simulation en chimie doit franchir un nouveau pas afin de pouvoir à l'avenir proposer des démarches de simulation reposant sur une modélisation de l'ensemble des processus pertinents mis en jeu dans les procédés.

Etat des lieux

La description, la compréhension et la prédiction des procédés physico-chimiques reposent de plus en plus sur la modélisation multi-échelle allant des simulations moléculaires *ab initio* aux codes d'hydrodynamique en passant par la dynamique moléculaire, les simulations Monte-Carlo et un large éventail d'approches mésoscopiques. Chaque approche est par principe exacte et présente des avantages et des inconvénients quand il s'agit d'en dériver des applications concrètes qui nécessitent approximations, hypothèses et autres restrictions. Ainsi à ce jour, l'emboîtement des différentes échelles, permettant de tirer des informations macroscopiques à partir de données microscopiques, n'est que rarement possible et abouti.

Objectif

L'objectif de ce séminaire est de dresser un état de l'art de ce qu'il est possible de faire aujourd'hui en modélisation en chimie aux différentes échelles de la matière, notamment de discuter des apports des modélisations menées aux échelles les plus fines de la matière pour améliorer les modélisations physico-chimiques réalisées aux échelles macroscopiques des procédés. Il vise donc à réunir les experts dans chaque domaine complémentaire lié à la modélisation multi-échelle, avec une attention particulière pour les applications aux métaux lourds que sont les actinides. A plus long terme, la Direction de l'Énergie Nucléaire du CEA souhaite initier des partenariats durables autour d'un objectif partagé de développement d'une plateforme de simulation multi-échelle en chimie dont les premières étapes concerneront d'abord la problématique des procédés d'extraction liquide-liquide.



Programme

Jeudi 14 Février

Introduction

- 9h30 Accueil, présentation du contexte et des objectifs Ch Poinssot (CEA), P. Turq (UPMC)
9h45 Les diverses modélisations pratiquées en France D. Borgis (ENS)
10h15 Expérience de l'IFPEN en modélisation multi-échelle H. Toulhoat (IFPEN)
10h45 Les objectifs de la plateforme simulation chimie de la DEN S. Bourg (CEA)

11h15 *Pause-Café*

1) Modélisations partant des principes premiers

- 11h30 Les modélisations *ab initio* R. Vuilleumier (ENS)
12h00 Les corrections quantiques aux modélisations classiques R. Spezia (Univ Evry)
12h30 Méthodes numériques en dynamique moléculaire et multi-échelle : deux exemples T. Lelièvre (ENPC)

13h00 *Pause-déjeuner (sur place)*

2) Modèles atomiques et mésoscopiques

- 14h00 Les dynamiques browniennes M. Jardat (UPMC)
14h30 Dynamique stochastique V. Dahirel (UPMC)
15h00 Dynamique sur réseau B. Rotenberg (UPMC)
15h30 Modèles analytiques J.F. Dufrêche (ICSM)

16h00 *Pause-café*

3) Problèmes spécifiques aux métaux lourds, lanthanides et actinides

- 16h30 Métaux lourds L. Maron (IRSAMC)
17h00 Chimie théorique des éléments f, de la structure à la thermodynamique J.P. Dognon (CEA)
17h30 Chimie d'éléments f pour l'industrie nucléaire P. Vitorge (CEA)
18h00 Métaux lourds V. Vallet (Univ Lille)
18h30 Une approche polarisable multi-échelle : prise en compte des effets hydrophobes et électrostatiques à longue portée M. Masella (CEA)

19h30 *Dîner (offert par le CEA)*

Vendredi 15 Février

4a) Applications : matériaux et stockage de l'énergie électrique

- 8h30 Matériaux Ch. Domain (EDF)
9h00 Super capacités M. Salanne (UPMC)
9h30 Piles à combustible A. Franco (CEA)
10h00 Batteries M.L. Doublet (Univ Montpellier)

10h30 *Pause-café*

4b) Applications existantes en physicochimie

- 11h00 Modélisation des procédés de séparation C. Sorel (CEA)
11h30 Approches DFT pour le nucléaire D. Guillaumont (CEA)
12h00 Simulations de dynamique moléculaire pour l'extraction liquide-liquide : activité chimique dans les phases aqueuse et organique Ph. Guilbaud (CEA)
12h30 Modélisation mésoscopique des microémulsions M. Duvail (ICSM)
13h00 *Pause-déjeuner (sur place)*
- 14h00 Equilibres entre fluides complexes: les limites de phases et les partitions d'espèces chargées sont-elles prédictibles ? T. Zemb (ICSM)
14h30 Modélisation des verres B. Guillot (UPMC)
15h00 Modélisation multi-échelle appliquée à la catalyse Th. De Bruin (IFPEN)
15h30 Les colloïdes L. Belloni (CEA)
16h00 D'une échelle à l'autre. Illustration en corrosion D. Di Caprio (Chimie Paristech)

16h30 *Pause-café*

17h00 Table ronde

18h00 *Fin*



Liste des Participants

Nom	Prénom	Organisme	CP	Ville	e-mail
ABADIE	Sacha	CNRS			Sacha.abadie@gmail.com
ALLAIRE	Gregoire	Ecole Polytechnique	91128	Palaiseau	gregoire.allaire@polytechnique.fr
AUPIAIS	Jean	CEA	91297	Arpajon	jean.aupiais@cea.fr
BALAGUER	Coralie	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	coralie.balaguer@cea.fr
BARON	Pascal	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Ceze	baron.pascal@cea.fr
BAROUH	Caroline	CEA Saclay	91191	Gif Sur Yvette	caroline.barouh@cea.fr
BELLONI	Luc	CEA Saclay	91191	Gif-Sur-Yvette	luc.belloni@cea.fr
BERNARD	Olivier	CNRS/UPMC	75252	Paris Cedex 05	olivier.bernard@upmc.fr
BONIN	Bernard	CEA Saclay	91191	Gif Sur Yvette Cedex	bernard.bonin@cea.fr
BORDIER	Gilles	CEA Marcoule	30207	BAGNOLS SUR CEZE	gilles.bordier@cea.fr
BORGIS	Daniel	ENS Paris et CNRS	75231	Paris	daniel.borgis@ens.fr
BOSSE	Emilie	AREVA	92084	Paris La Défense Cedex	emilie.bosse@areva.com
BOURG	Stéphane	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	stephane.bourg@cea.fr
BRIZZI	Robert	Ecole Polytechnique	91128	Palaiseau	robert.brizzi@polytechnique.fr
CANEL	Jérôme	CEA Saclay	91191	Gif Sur Yvette	jerome.canel@cea.fr
DAHIREL	Vincent	UPMC	75005	Paris	vincent.dahirel@upmc.fr
DE BRUIN	Theo	IFP Energies nouvelles	92852	Rueil-Malmaison	theodorus.de-bruin@ifpen.fr
DI CAPRIO	Dung	Chimie ParisTech, CNRS	75005	Paris	dung.dicaprio@yahoo.fr
DINH	Binh	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	binh.dinh@cea.fr
DOGNON	Jean-Pierre	CEA Saclay	91191	Gif-Sur-Yvette	jean-pierre.dognon@cea.fr
DOMAIN	Christophe	EDF R&D	77250	Moret Sur Loing	christophe.domain@edf.fr
DOUBLET	Marie-Liesse	Institut Charles Gerhardt	34095	Montpellier	doublet@um2.fr
DUFRECHE	Jean-François	ICSM UMR 5257	30207	Bagnols Sur Cèze Cedex	jean-francois.dufreche@icsm.fr
DUVAIL	Magali	ICSM - UMR 5257	30207	Bagnols Sur Cèze	magali.duvail@cea.fr
FRANCO	Alejandro A.	UPJV-LRCS	38410	Vaulmaveys Le Haut	a.a.franco.electrochemistry@gmail.com
FRIES	Pascal H.	CEA-Grenoble	38054	Grenoble Cedex 09	pascal-h.fries@cea.fr
GUILBAUD	Philippe	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze Cedex	philippe.guilbaud@cea.fr
GUILLAUMONT	Dominique	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	dominique.guillaumont@cea.fr
GUILLOT	Bertrand	LPTMC-Paris 6	75252	Paris	guillot@lptmc.jussieu.fr
HERES	Xavier	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Ceze	xavier.heres@cea.fr
HOURIEZ	Céline	Université Paris-Est	77454	Marne-La-Vallée	celine.houriez@gmail.com
JARDAT	Marie	UPMC	75005	Paris	marie.jardat@upmc.fr
KACHMAR	Ali	LPTMC-UMR CNRS 7600	75252	Paris	kachmar@lptmc.jussieu.fr
KEFALIDIS	Christos	INSA Toulouse	31077	Toulouse	christos.kefalidis@insa-toulouse.fr
LECOMTE	Michaël	CEA Marcoule	30207	Bagnols-Sur-Cèze	michael.lecomte@cea.fr
LELIEVRE	Tony	Ecole des Ponts	77455	Champs Sur Marne	lelievre@cermics.enpc.fr
LIMOGES	Yves	CEA Saclay	75005	Paris	dael.3@orange.fr
LUDL	Adriaan	IMPMC	75005	Paris	ludl@impmc.upmc.fr
MARON	Laurent	Université de Toulouse	31077	Toulouse	laurent.maron@irsamc.ups-tlse.fr
MARTIN SOMER	Ana	Université d'Evry	91025	Evry	ana.somer@uam.es
MASELLA	Michel	CEA Saclay	91191	Gif Sur Yvette	michel.masella@cea.fr
MOISY	Philippe	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	philippe.moisy@cea.fr
PACARY	Vincent	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	vincent.pacary@cea.fr
POINSSOT	Christophe	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze	christophe.poinssot@cea.fr
PORRACCHIA	Alain	CEA Saclay	91191	Gif Sur Yvette Cedex	alain.porracchia@cea.fr
POUCHAN	Claude	CNRS	75016	Paris	Claude.pouchan@cnrs-dir.fr
ROTENBERG	Benjamin	CNRS et UPMC, PECSA	75005	Paris	benjamin.rotenberg@upmc.fr
SALANNE	Mathieu	UPMC	75005	Paris	mathieu.salanne@upmc.fr
SAUTET	Philippe	CNRS	69364	Lyon	Philippe.Sautet@ens-lyon.fr
SIBOULET	Bertrand	ICSM	30207	Bagnols Sur Cèze	bertrand.siboulet@cea.fr
SOREL	Christian	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Cèze Cedex	christian.sorel@cea.fr
SPEZIA	Riccardo	CNRS / Univ Evry	91025	Evry	riccardo.spezia@univ-evry.fr
THIEBLEMONT	Jean-Claude	CEA Marcoule	30207	Bagnols Sur Ceze	jean-claude.thieblemont@cea.fr
TOULHOAT	Hervé	IFPEN	92852	Rueil-Malmaison	herve.toulhoat@ifpen.fr
TURQ	Pierre	UPMC/PECSA	75005	Paris	pierre.turq@upmc.fr
VALLET	Valérie	CNRS	59565	Villeneuve D'Ascq Lille	valerie.vallet@univ-lille1.fr
VILLARD	Arnaud	ICSM/LMCT	30207	Bagnols/Cèze	arnaud.villard@cea.fr
VITORGE	Pierre	CEA Saclay	91191	Gif-Sur-Yvette	pierre.vitorge@cea.fr
VUILLEUMIER	Rodolphe	UPMC	75005	Paris	rodolphe.vuilleumier@ens.fr
WARIN	Dominique	CEA Saclay	91191	Gif Sur Yvette	dominique.warin@cea.fr
ZEMB	Thomas	CEA	30207	Bagnols Sur Ceze Cedex	thomas.zemb@icsm.fr

Contacts

Pierre Turq

pierre.turq@upmc.fr

UPMC et DRCP,
CEA Marcoule

Christophe Poinssot

christophe.poinssot@cea.fr

DRCP, Bat 400, CEA Marcoule
30207 Bagnols sur Cèze, Cedex

Stéphane Bourg

stephane.bourg@cea.fr

DRCP, Bat 400, CEA Marcoule
30207 Bagnols sur Cèze, Cedex

Jean François Dufreche

jean-francois.dufreche@icsm.fr

ICSM et UMII, CEA Marcoule
30207 Bagnols sur Cèze, Cedex



cfcam
Centre Français de Calcul
Atomique et Moléculaire

