

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

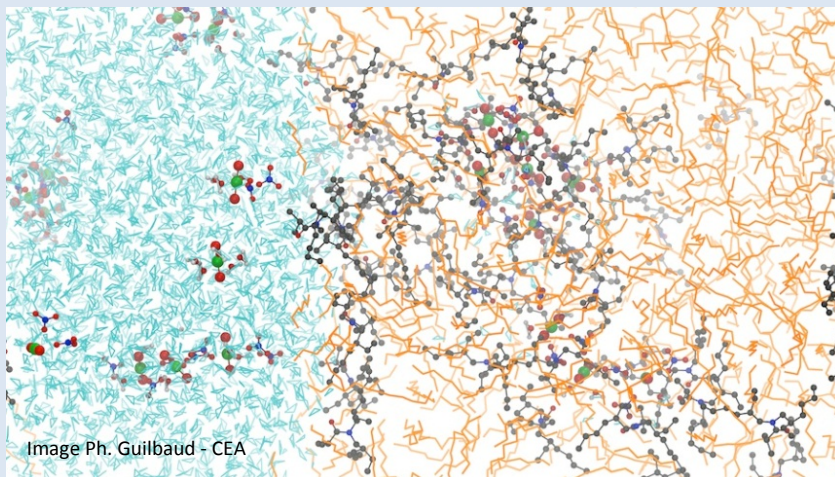
Séminaire

# 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 provisoire

## 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 <i>ab initio</i>	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 *Diner (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. Guilhaud (CEA)
12h30	Modélisation mésoscopique des microémulsions	M. Duvail (ICSM)
13h00	<i>Pause-déjeuner (sur place)</i>	
14h00	Titre à définir	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 et projets

18h00 *Fin*



## Contacts

### **Pierre Turq**

[Pierre.turq@upmc.fr](mailto:Pierre.turq@upmc.fr)

Université Pierre & Marie Curie Paris et  
Département RadioChimie et Procédés, CEA Marcoule

### **Christophe Poinssot**

[Christophe.poinssot@cea.fr](mailto:Christophe.poinssot@cea.fr)

Département RadioChimie et Procédés  
Bat 400, CEA Marcoule  
30207 Bagnols sur Cèze, Cedex

### **Stéphane Bourg**

[Stephane.bourg@cea.fr](mailto:Stephane.bourg@cea.fr)

Département RadioChimie et Procédés  
Bat 400, CEA Marcoule  
30207 Bagnols sur Cèze, Cedex

### **Jean François Dufrière**

[Jean-françois.dufreche@icsm.fr](mailto:Jean-françois.dufreche@icsm.fr)

ICSM et Université Montpellier II  
CEA Marcoule  
30207 Bagnols sur Cèze, Cedex

