

Numéro 2 Novembre 2007

*L'IFP est un organisme public de recherche et de formation, à l'expertise internationalement reconnue, dont la mission est de développer les énergies du transport du XXI<sup>e</sup> siècle.*

Le Grenelle de l'Environnement a renforcé la prise de conscience de la nécessité de réduire les émissions de gaz à effet de serre et de polluants atmosphériques. Ce second numéro de Science@ifp illustre des avancées scientifiques qui y contribuent. Ainsi, la combustion à basse température dans les nouveaux moteurs diesel permet à la fois de réduire la consommation et les émissions de particules des véhicules automobiles. Par ailleurs, les outils de modélisation moléculaire développés par l'IFP avec ses partenaires académiques contribuent à la connaissance des équilibres de phase intéressant le stockage de CO<sub>2</sub> dans des réservoirs souterrains. Comme le montrent les autres rubriques, afin d'assurer une transition énergétique maîtrisée, l'IFP poursuit ses travaux pour améliorer les technologies pétrolières en exploration, production et raffinage qui resteront encore longtemps indispensables pour assurer notre approvisionnement énergétique.

**Philippe Ungerer**  
Directeur scientifique

## Regarder sous les diapirs

Pour caractériser les gisements, l'imagerie sismique est un outil essentiel. Les progrès réalisés au cours des dernières décennies ont permis d'imager en 3D les structures complexes, notamment les diapirs (ou dômes de sel), et les structures sous-jacentes. La difficulté réside dans le contraste des vitesses des ondes, dont l'estimation précise de la distribution spatiale est de plus en plus nécessaire (Fig. 1). Dans le cadre des consortiums PSI puis KIM, l'IFP a développé une approche originale fondée sur l'inversion des

temps d'arrivée de certains événements sismiques. Remédier à certaines pathologies inhérentes à ce problème inverse<sup>1,2</sup> a permis, notamment via l'exploitation des réflexions en coin, de déterminer la géométrie surplombante des diapirs et de préciser ainsi l'extension de certains gisements (Fig. 2). ■

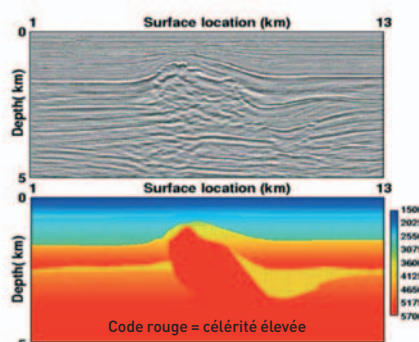


Fig. 1 : Image sismique 3D d'une ride salifère et modèle de vitesse : la délinéation imprécise de la partie surplombante détériore l'image.

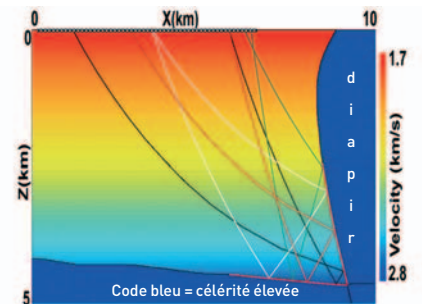


Fig. 2 : Les réflexions en coin apportent une information précieuse quant à la partie surplombante des diapirs.

<sup>1</sup>Delprat-Jannaud F. et Lailly P., *J. Geophys. Research*, 98, 6589-6605, 1993.

<sup>2</sup>Cavalca M. et Lailly P., *Inverse Problems*, 23, 139-163, 2006.

contact scientifique :  
patrick.lailly@ifp.fr

## La RMN entre dans le puits

Outil bien connu d'analyse moléculaire et d'imagerie en chimie et en médecine, la résonance magnétique nucléaire (RMN) est maintenant également utilisée par les pétrophysiciens pour caractériser les milieux poreux et les fluides pétroliers et ainsi améliorer l'exploitation des gisements.

L'apparition d'outils RMN de puits dans les années 1990 permet des mesures *in situ* remarquables, notamment en utilisant des champs magnétiques faibles (0.05T). L'information exploitée est la relaxation de l'aimantation nucléaire portée par les molécules (superposition d'exponentielles décroissantes). Plus précisément, dans un milieu poreux saturé en eau, le mécanisme de relaxation exploité est l'interaction entre la surface poreuse et les molécules du fluide. Par diffusion, celles-ci explorent en effet la surface sur une épaisseur faible (quelques Å) et renseignent ainsi sur les tailles de

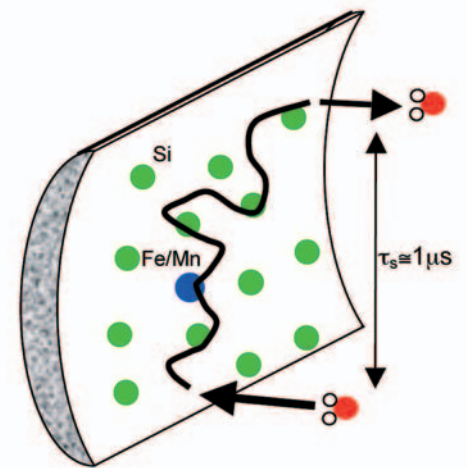
pores, dans une gamme de 1nm à 1mm. On peut ainsi caractériser *in situ* les milieux poreux qui intéressent le domaine pétrolier (milieux argileux, carbonates microporeux, charbon, catalyseurs).

Mais l'interprétation de ces mesures, difficile, implique la compréhension des interactions nucléaires liquide-solide, dépendant du fluide et de la surface. À cette fin, en collaboration avec l'École polytechnique, l'IFP a réussi à estimer les temps de séjour des molécules à la surface, et à en déduire les diffusivités de surface ainsi que leur dépendance en température. ■

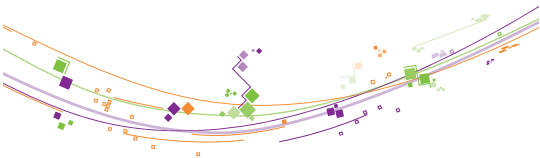
Godefroy S., Korb J.-P., Fleury M., Phys. Rev. E, 64, 2001.

Godefroy S., Fleury M., Deflandre F., Korb J.-P., J. Phys. Chem., 106, 2002.

**contact scientifique :**  
marc.fleury@ifp.fr



*Représentation schématique de la diffusion de surface du fluide (e.g. H<sub>2</sub>O, rouge et blanc). Les interactions avec les impuretés paramagnétiques de surface (en bleu, par exemple Fe ou Mn, se substituant à Si, en vert) sont intenses et causent un incrément de relaxation mesurable. Elles renseignent sur le temps de corrélation de la diffusion de surface  $\tau_m \sim 1ps$ . Cette diffusion est limitée par la désorption, définie par le temps de séjour de surface  $\tau_s \sim 1\mu s$ .*



## Réacteurs en lit fluidisé : optimisation des zones réactionnelles

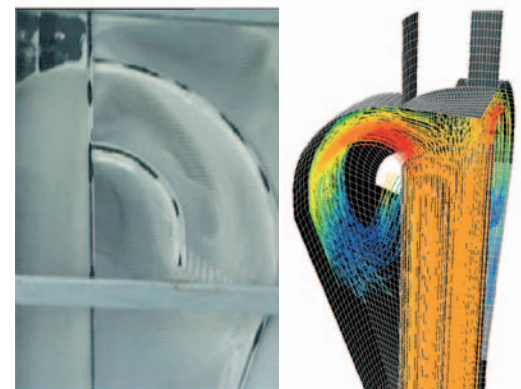
Les réacteurs en lit fluidisé, largement utilisés par le raffinage, trouvent aujourd'hui de nouvelles perspectives d'utilisation avec la valorisation de sources d'énergies alternatives (biomasse, gaz ou charbon) ou le captage du CO<sub>2</sub> par Chemical Looping.

L'IFP travaille depuis de nombreuses années sur ces réacteurs pour mieux comprendre écoulements et transferts afin notamment d'optimiser les zones réactionnelles des procédés de conversion. De nombreux travaux ont ainsi été conduits par l'IFP en collaboration, notamment avec l'université du Western Ontario (Canada), l'INPT, l'UTC et le PSRI (Particulate Solid Research Inc.).

Dans les réacteurs en lit fluidisé, le mouvement des particules est bénéfique mais complexifie l'hydro-

dynamique. Malgré une littérature abondante, la prédiction des écoulements dans ce type de réacteurs reste délicate. Pour progresser, expérimentation ciblée et modélisation des écoulements doivent être combinées. L'expérimentation doit être définie en fonction des effets d'échelles et des forces interparticulaires. Il faut adapter ou développer des méthodes de mesure et décrire les phénomènes qui se déroulent dans des réacteurs comme ceux de craquage catalytique.

Depuis dix ans, la CFD (*Computational Fluid Dynamics*) est utilisée pour calculer les écoulements dans ces réacteurs. Malheureusement, les modèles physiques décrivant les interactions entre gaz et particules sont inadaptés pour les fines particules. Il faut donc adapter les lois de fermeture et valider les simulations. ■



*Expérimentation et simulation 3D de la séparation gaz-particules dans une zone réactionnelle de FCC (Fluid Catalytic Cracking).*

Herbert P.M., Gauthier T.A., Briens C.L. and Bergounou M.A., Powder Technology, 80 (3), 243-252 (1994).

Gauthier T., Andreux R., Verstraete J., Roux R., Ross J., International Journal of Chemical Reactor Engineering, vol.3, A47 (2005)

**contact scientifique :**  
thierry.gauthier@ifp.fr

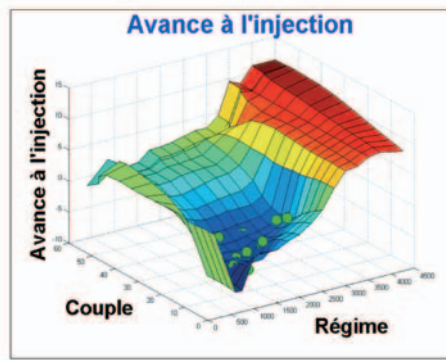
# Optimiser des systèmes complexes

L'optimisation intervient dans de nombreuses applications IFP : estimation de paramètres de modèles numériques à partir de données expérimentales (Sciences de la Terre, combustion dans les moteurs), aide à la conception (réseaux de conduites pétrolières), optimisation de réglages de dispositifs expérimentaux (calibration des moteurs, catalyse). Ces optimisations consistent à minimiser une fonctionnelle complexe (non linéarités, bruit), coûteuse à estimer (résolution d'un modèle numérique basé sur des systèmes différentiels, mesures expérimentales), dont les dérivées ne sont pas disponibles, avec des contraintes non linéaires, parfois avec plusieurs objectifs pour lesquels il faut trouver les meilleurs compromis.

Depuis plusieurs années, l'IFP mène une recherche active dans ce domaine et développe ses propres outils d'optimisation afin de répondre au mieux aux besoins des applications.

SQPAL est ainsi une méthode de programmation quadratique successive adaptée aux problèmes d'optimisation non linéaire sous contraintes, développée en partenariat avec l'INRIA (pour les codes industriels TOMOinv<sup>1</sup>, Condor<sup>Flow</sup>).

L'IFP développe aussi des méthodes d'optimisation basées sur des modèles approchés peu coûteux à évaluer : (i) modèles physiques réduits comme pour l'inversion des modèles stratigraphiques (codes Lithopsi, Dionisos<sup>2</sup>),



(ii) surfaces de réponses construites à partir d'un nombre limité d'évaluations du modèle numérique complexe (calage historique de données de production en ingénierie de réservoirs pétroliers) ou à partir de données expérimentales (calibration des moteurs, cf. Figure). ■

<sup>1</sup>Delbos F., Gilbert J.C., Glowinski R., Sinoquet D., *Geophys. J. Int.*, 164, pp. 670-684 (2006).

<sup>2</sup>Blum J., Dobranszky G., Eymard R., Masson R., *Inverse Problems*, 22, pp. 1207-1225, (2006).

contact scientifique :  
delphine.sinoquet@ifp.fr

*Exemple de cartographie du réglage de l'avance à l'injection (sur le domaine de fonctionnement du moteur décrit par le régime et le couple) minimisant les émissions de polluants pour un moteur diesel. Les points de fonctionnement de référence pour le respect de la norme européenne (cycle NEDC) sont indiqués en vert.*

# Réduire la pollution en pilotant les soupapes

Avec un bon rendement thermique couplé à des émissions de CO<sub>2</sub> faibles, les moteurs diesel sont aujourd'hui très bien placés pour répondre aux enjeux énergétiques et environnementaux des transports de demain. Toutefois, l'évolution attendue des normes nécessite de réduire leurs émissions d'oxydes d'azote et de particules. C'est ce que permettent les nouveaux procédés de combustion diesel basse température tels que le concept NADI<sup>TM</sup> développé par l'IFP. Cependant, ils présentent encore des inconvénients non négligeables tels qu'une plage limitée de fonctionnement à très faibles émissions d'oxydes d'azote (NO<sub>x</sub>), une forte demande en Recirculation des Gaz d'Échappement (EGR), et surtout des émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC) et de monoxyde de carbone (CO) élevées à faible puissance.

Dans ce contexte, l'IFP, dans le cadre des projets européens Spacelight et Nice, a amélioré le potentiel des nouvelles combustions basse température en utilisant un système de distribution variable (modulation des lois de levée soupape, VVA) pour générer une recirculation interne des gaz brûlés en conservant ou en réintroduisant une partie de ceux-ci dans la chambre de combustion. La configuration avec réouverture de l'échappement pendant l'admission offre le meilleur compromis sur les points très peu chargés, les plus problématiques (faible puissance, catalyseur trop froid donc non amorcé), et conduit à une forte réduction des émissions (HC : -70 %, CO : -40 %, NO<sub>x</sub> < 0.1 g/kWh) avec une consommation en carburant maîtrisée. ■

contact scientifique :  
bruno.walter@ifp.fr

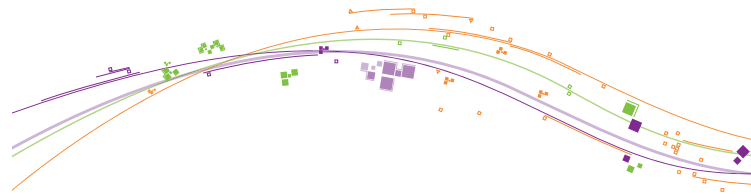


*Vue schématique du moteur monocylindre IFP avec système VVA Lotus*

Walter B., Pacaud P., Gatellier B., Journée SIA Variable Valve Actuation, Novembre 2006.

Bression G., Soleri D., Savy S., Dehoux S., Azoulay D., Ben-Hadj Hamouda H., Doradoux L., Bastardie B., Lawrence N., 6<sup>th</sup> Symposium Towards Clean Diesel Engine - Napoli, 2007.

# Thermo : du nano au macro



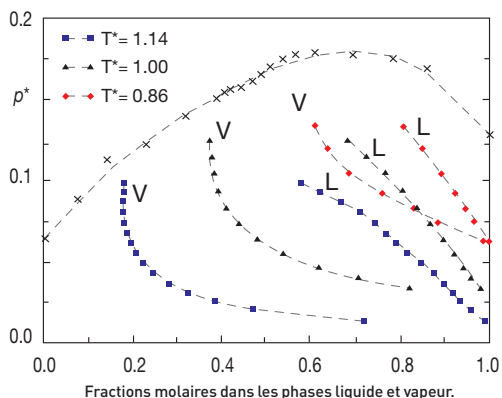
L'IFP développe depuis de nombreuses années des méthodes de simulation moléculaire, appliquées en particulier dans le cadre du stockage du CO<sub>2</sub>.

Les modèles thermodynamiques couramment utilisés pour la conception des procédés (équations d'état, contributions de groupes) doivent

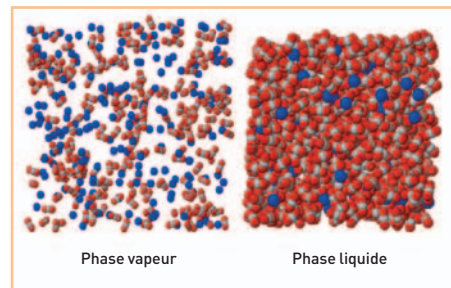
généralement s'appuyer sur de nombreuses données expérimentales. De plus, ils représentent mal le voisinage du point critique.

Depuis plus de dix ans, l'IFP apporte sa contribution à ce problème en développant des méthodes de simulation moléculaire en collaboration avec l'Université Paris Sud et d'autres laboratoires. Ces méthodes, fondées sur des algorithmes de Monte Carlo, ont une meilleure base physique. Elles autorisent le calcul des propriétés de systèmes peu étudiés ou celui des points critiques avec le bon comportement d'échelle. Grâce à leur implantation dans le logiciel polyvalent GIBBS, ces méthodes sont appliquées à des systèmes d'intérêt industriel ; les mélanges H<sub>2</sub>S-hydrocarbures, par exemple, dont la compréhension est utile à l'exploitation de certains gisements de gaz et dont la caractérisation expérimentale serait dangereuse (collaboration avec Total).

Plusieurs projets ANR permettent d'apporter les données nécessaires au stockage souterrain de CO<sub>2</sub>.



Mélange binaire de deux types de particules de Lennard-Jones. Pression et température sont réduites par rapport aux paramètres de Lennard-Jones. Les croix représentent le lieu des points critiques du mélange.



Boîtes de simulation illustrant l'équilibre liquide-vapeur d'un mélange CO<sub>2</sub>-Ar (248 K, 5 MPa) (un centre de force par atome ; C=gris ; O=rouge ; Ar=bleu)

Ungerer P., Beauvais C., Delhommelle J., Boutin A., Rousseau B., Fuchs A.H., *J. Chem. Phys.* 2000, 112, 5499-5510.

Ungerer P., Lachet V., Tavitian B. *Oil and gas science and technology* 2006, 61, 387-403.

contact scientifique :  
veronique.lachet@ifp.fr

## Visite de la NSF

La NSF (National Science Foundation, USA) a missionné à l'IFP un groupe de quatre experts en septembre 2007 pour dresser un état des techniques scientifiques les plus avancées dans le domaine de la catalyse. Cette visite s'inscrit dans le cadre d'une enquête de la NSF auprès des meilleurs laboratoires mondiaux en synthèse de structures catalytiques, caractérisation des catalyseurs à l'échelle nanométrique, modélisation et applications.

## Projets ANR 2007

Sur les 35 projets proposés auxquels l'IFP participait, 19 ont été acceptés (dont 6 en liste complémentaire) dans les programmes PREDIT, CO<sub>2</sub>, PNRB, Blanc, Stock-E, RNTL, Calcul Intensif et Matériaux-Procédés.

## Ouvrages

Pierre Duret et Bertrand Gatellier ont rédigé les chapitres sur le 2T CAI et sur le procédé NADI pour l'ouvrage "HCCI and CAI engines for the automotive industry" édité par Hua Zhao chez Woodhead Publishing.

## Distinctions

• **Nadège Bouchonneau** a remporté le 1<sup>er</sup> prix "A'Doc 2007" délivré par l'université de Franche-Comté pour sa thèse "Étude du comportement des systèmes d'isolation thermique pour les grandes profondeurs d'eau" soutenue le 14 mars 07.

• **Jean Kittel** a reçu le diplôme d'honneur 2007 "Jeune chercheur en corrosion" du Cefracor, pour ses travaux sur les mécanismes de corrosion et les modes de protection des surfaces métalliques.

• **Véronique Smanio** a reçu le prix Jeune chercheur du congrès Eurocorr 2007 (9-13 septembre 07, Freiburg im Breisgau).

## Habilitation à diriger des recherches

• **Alain Méthivier** - HDR de l'Université Claude Bernard (Lyon 1) : "Sélectivités d'adsorption dans les systèmes zéolithes / hydrocarbures" (12 septembre 07).

• **Christophe Boyer** - HDR de l'Institut National Polytechnique de Toulouse : "Contribution à l'étude des phénomènes de transport dans les contacteurs gaz/liquide supportés" (19 octobre 07).

## Colloques

### Reducing CO<sub>2</sub> emissions

(22-24 janvier 2008, IFP-Lyon).  
Workshop commun des projets européens Castor, Encap, Cachet et Dynamis.

### ESCAPE 18 - European Symposium on Computer Aided Process Engineering

(1-4 juin 2008, Lyon)

[www.ifp.fr](http://www.ifp.fr)

Pour prendre contact avec l'IFP  
ou pour recevoir Science@ifp :

Direction de la Communication -  
Tél. : +33 1 47 52 59 00 - Fax : +33 1 47 52 70 96 -  
Science@ifp.fr - 1 et 4 avenue de Bois-Préau -  
92852 Rueil-Malmaison Cedex - France

### Contact presse :

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

### Contact institutionnel :

K. Ragil - Tél. : 01 47 52 58 75

Directeur de la publication : Marco De Michelis • Rédacteur en chef : Philippe Ungerer • Rédacteur en chef adjoint : Gilles Perrin

Comité éditorial : Denis Babusiaux, Hugues Bédouelle, Pierre Galtier, Alain-Yves Huc, Patrick Lailly, John Lynch, Xavier Montagne, Benoît Noetinger, Christian Ravenne, Yolande Rondot, François Roure, Julie Svay-Lucas, Hervé Toulhoat • Conception graphique : Esquif - N° ISSN : 1957-3537

Science@ifp Numéro 2 • Novembre 2007