

# Science@ifp

N°4 - Octobre 2008



S'inscrire dans une démarche de développement durable est l'un des engagements forts de l'IFP et les

5 priorités stratégiques — CO<sub>2</sub> maîtrisé, carburants diversifiés, véhicules économes, raffinage propre, réserves prolongées — qui gouvernent ses actions l'illustrent parfaitement. Le numéro 4 de Science@ifp présente une sélection de publications récentes qui témoignent de l'action de l'IFP dans ce contexte. Ainsi, simuler la dynamique complète d'un bassin sédimentaire, maîtriser la géométrie des réseaux de fractures des puits, reconstruire informatiquement des coupes pétrolières complexes, proposer de nouvelles approches de contrôle moteur pour une meilleure maîtrise de l'énergie à bord des véhicules hybrides, ou bien encore montrer une autre façon d'exploiter le potentiel de l'éthanol comme alternative aux carburants conventionnels sont les contributions proposées.

En espérant que ce numéro retienne toute votre attention...

Xavier Montagne  
Directeur scientifique adjoint

## Potentiel d'un moteur dédié à l'éthanol

Dans un contexte de réduction des émissions de gaz à effet de serre et de diversification énergétique dans les transports, l'éthanol a un potentiel important, surtout lorsqu'il est produit par voie lignocellulosique (deuxième génération). De plus, les propriétés de l'éthanol sont extrêmement intéressantes pour les moteurs à allumage commandé, grâce notamment à son indice d'octane très élevé.

L'IFP a démontré le potentiel d'un tel carburant en développant un moteur dédié à l'éthanol et en l'optimisant partiellement. Un moteur de SMART de faible cylindrée a ainsi été modifié pour optimiser le taux de compression, les matériaux, mais aussi les lois de contrôle (cartographies moteur). Il en est résulté une augmentation substantielle de la puissance et du couple (exprimé en Pression Moyenne Effective, Fig. 1) et une

nette diminution des émissions d'hydrocarbures imbrûlés.

De plus, cette optimisation a permis de réduire de 9 % les émissions de CO<sub>2</sub> à l'échappement du véhicule (Fig. 2), ce qui vient renforcer le bilan positif du puits à la roue de la filière éthanol.

Ce développement démontre le potentiel de l'éthanol carburant et a ouvert la voie à de nouvelles études d'optimisation de la combustion de l'éthanol, études actuellement en cours à l'IFP, notamment sur les moteurs à injection directe d'essence.

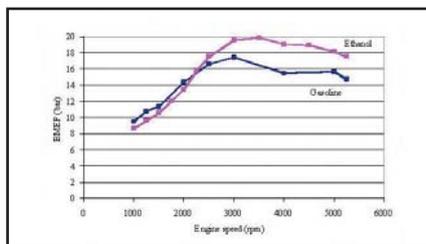


Fig. 1 : Pression Moyenne Effective en fonction du régime et du carburant (équivalent du couple moteur).

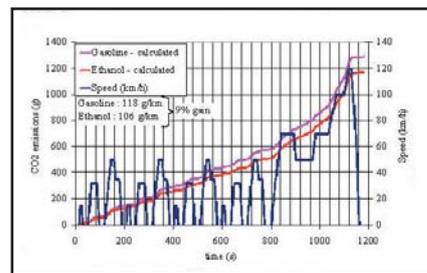


Fig. 2 : Émissions cumulées de CO<sub>2</sub> sur cycle NEDC.

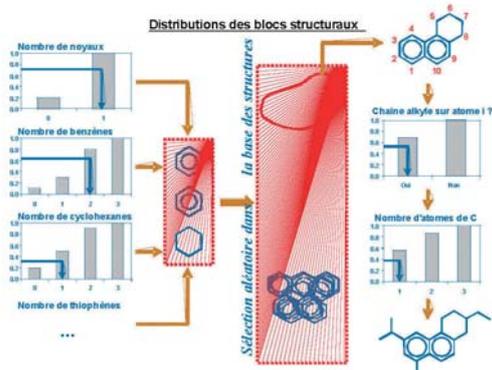
"Potentiality of ethanol as a fuel for dedicated engine", N. Jeuland, X. Montagne, X. Gautrot, Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, Vol. 59 (2004), No. 6, pp. 559-570  
DOI: 10.2516/ogst.2004040

contact scientifique :  
nicolas.jeuland@ifp.fr

L'IFP est un organisme public de recherche et de formation, à l'expertise internationalement reconnue, dont la mission est de développer les technologies et matériaux du futur dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement.

# Reconstruction moléculaire de coupes pétrolières

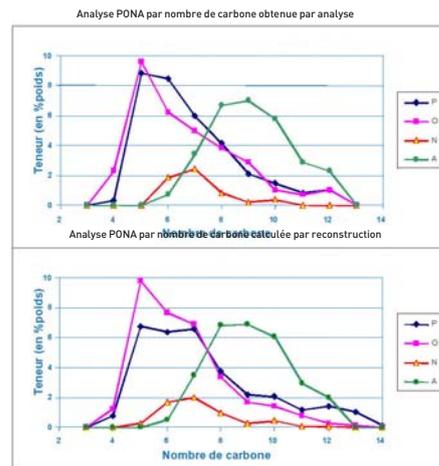
L'optimisation des procédés de raffinage nécessite le développement de modèles cinétiques de plus en plus précis. Il est donc important de disposer d'une représentation moléculaire détaillée des coupes pétrolières. Les techniques analytiques actuelles ne permettent de caractériser du point de vue moléculaire que les fractions contenant jusqu'à neuf atomes de carbone, en raison du grand nombre d'isomères aux propriétés proches.



Méthode de reconstruction stochastique.

Différentes méthodes ont donc été développées pour "reconstruire", à l'aide d'outils informatiques, des mélanges de molécules à partir des données analytiques disponibles. Ces techniques de reconstruction moléculaire, fondées sur des principes stochastiques, statistiques, ou faisant appel à la maximisation d'entropie, ont été appliquées avec succès à des coupes essences, gazoles, distillats sous vide et résidus. Elles ont permis de proposer des mélanges synthétiques renfermant un nombre important de molécules et ayant les propriétés des coupes pétrolières.

Les mélanges reconstruits servent alors de base au développement de modèles. Par exemple, dans le cas des résidus, il est possible de fournir une représentation détaillée et de développer des modèles cinétiques moléculaires. La force de cette approche réside dans la réconciliation des différentes méthodes d'analyses et dans la représentation polydispense du mélange. ■



Comparaison entre l'analyse PONA (paraffines, oléfines, naphthènes, aromatiques) obtenue par analyse et celle prédite par reconstruction.

Molecular reconstruction of LCO gasoils from overall petroleum analyses, D. Hudebine, J. Verstraete, Chem. Eng. Sci., 59, 4755-4763, 2004 - DOI: 10.1016/j.ces.2004.09.019

Molecular reconstruction of naphtha steam cracking feedstocks based on commercial indices, K.M. Van Geem, D. Hudebine, M-F. Reyniers, F. Wahl, J. Verstraete, G.B. Marin, Comp. Chem. Eng., 31, 9, 1020-1034, 2007 DOI: 10.1016/j.compchemeng.2006.09.001

contact scientifique :  
jan.verstraete@ifp.fr

## Modèles microcinétiques pour les coupes pétrolières complexes

La modélisation cinétique des procédés de pétrochimie, permettant de les optimiser, est particulièrement difficile du fait du très grand nombre de réactifs présents dans les charges. Une solution est d'en regrouper les constituants. Pour cela, différentes stratégies sont proposées suivant le type de coupe pétrolière.

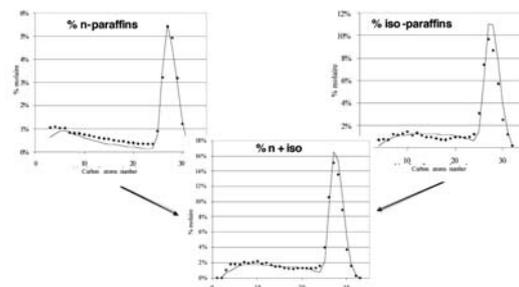
Pour les distillats et la catalyse hétérogène bifonctionnelle, la méthode de construction d'un modèle par "événements constitutifs" comprend :

- la génération informatique du réseau complet d'étapes réactionnelles élémentaires entre tous les carbocations présents à la surface de la phase acide,
- une stratégie de réduction du nombre de constantes cinétiques,
- une procédure rigoureuse de regroupement *a posteriori*.

Une deuxième méthode de regroupement *a posteriori*, ne demandant pas la génération du réseau réactionnel mais fondée sur un inventaire informatique des complexes activés, a été mise au point. Elle ouvre la possibilité d'extrapoler le modèle aux coupes lourdes pétrolières, ce qui a été démontré par la simulation de l'hydroisomérisation des cires Fischer-Tropsch. Plus récemment, en coopération avec l'Université de Gand (Belgique), elle a été étendue avec succès à la description des réactions de la catalyse métallique. ■

A single events kinetic model: n-butane isomerisation. K. Surla, H. Vleeming, D. Guillaume, P. Galtier, Chemical Eng. Sci., vol.59(22-23), 2004, pp. 4773-4779. DOI: 10.1016/j.ces.2004.07.036

A single events kinetic model for the hydrocracking of paraffins in a three-phase reactor, J.M. Schweitzer, P. Galtier, D. Schweich, Chem. Eng. Sci., vol.54, 1999, pp. 2441-2452 - DOI: 10.1016/S0009-2509(99)00006-8



Comparaison Mesures / Modélisation.

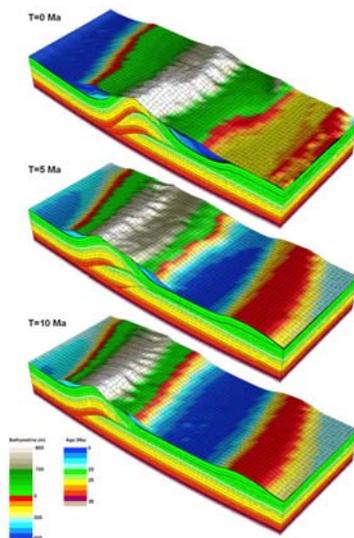
Kinetic methods in petroleum process engineering. P. Galtier, Advances in chemical engineering, 2007, vol.32, pp.264-307.

contact scientifique :  
pierre.galtier@ifp.fr

# Modélisation stratigraphique et tectonique complexe

Pour améliorer le taux de succès des forages d'exploration, l'IFP développe, depuis le début des années 1990, un modèle stratigraphique numérique, *Dionisos*, qui permet de simuler l'évolution des bassins sédimentaires au cours des temps géologiques. Les premiers travaux ont permis d'étudier l'évolution des deltas et des plates-formes carbonatées. Durant les quatre dernières années, d'importants travaux ont été menés en sédimentologie et en mathématiques appliquées, afin d'optimiser les schémas numériques et d'enrichir la liste des processus physiques pris en compte par le modèle *Dionisos* (érosion des flancs de montagnes, avulsion des fleuves, croissance de récifs coralliens, formation de diapirs, etc.).

*Dionisos* peut désormais simuler l'interaction entre les processus tectoniques et sédimentaires depuis la



Modélisation du remplissage de bassins sédimentaires en zones tectoniques actives.

croissance d'une chaîne de montagne jusqu'au transport et dépôt des sédiments dans les bassins profonds. Il est actuellement utilisé en exploration

pétrolière lors de l'évaluation de zones frontières ou la délimitation de prospects.

Des travaux sont en cours pour mieux décrire le transport des sédiments fins et la production des évaporites. Ceci permettra, à terme, de coupler *Dionisos* à des modèles climatiques et de simuler ainsi la dynamique complète d'un bassin sédimentaire.

Ce projet fait l'objet d'un consortium de recherche soutenu par huit partenaires depuis 10 ans et a déjà abouti à un logiciel industriel commercialisé par Beicip-Franlab. ■

*H. Alzaga-Ruiza, D. Granjeon et al., 2008, Gravitational collapse and neogene sediment transfer across the western margin of the Gulf of Mexico: Insights from numerical models, in tectonophysics DOI:10.1016/j.tecto.2008.06.017*

contacts scientifiques :  
didier.granjeon@ifp.fr  
sylvie.wolf@ifp.fr

# Automatique et traitement du signal pour le contrôle moteur

L'automatique et le traitement du signal jouent désormais un rôle croissant et capital dans le fonctionnement des véhicules. En effet, pour faire face aux contraintes de consommation et de pollution, l'énergie doit être produite puis distribuée aux roues de façon optimale.

Du point de vue technique, la meilleure combinaison des actionneurs doit être recherchée en fonction d'informations mesurées ou estimées sur l'état du système. L'estimation de paramètres non mesurés (température dans la chambre de combustion, état de charge de la batterie, etc.), la conception de contrôleurs multivariables et non linéaires, et leur implémentation dans le logiciel temps réel embarqué sont les principaux verrous à lever. De plus, systèmes embarqués et fréquence variable sont des contraintes pour le design algorithmique. Du point de vue

scientifique, des pistes originales sont recherchées. Ainsi, l'exploitation du caractère cyclo-stationnaire du moteur a permis d'accroître la convergence d'un estimateur de couple.

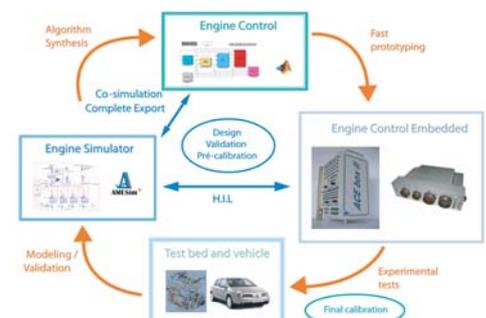
L'hybridation du véhicule renforce le rôle du contrôle avec une gestion de l'énergie primordiale pour diminuer la consommation. La nouvelle génération du gestionnaire d'énergie s'appuie sur les techniques de l'automatique, qui remplaceront à terme les heuristiques implantés initialement. ■

*J. Chauvin, G. Corde, N. Petit, P. Rouchon, Automatica, vol. 43, pp. 971-980, 2007.  
DOI : 10.1016/j.automatica.2006.12.012  
L. Guzzella, A. Sciarretta, Vehicle Propulsion Systems - Introduction to Modeling and Optimization, Springer 2005.  
ISBN 3540251952, 9783540251958*

contact scientifique :  
gilles.corde@ifp.fr



Véhicule hybride gaz naturel où le contrôle moteur thermique/hybride est entièrement réalisé par l'IFP. Partenaires du projet : ADEME, GDF SUEZ, Inrets, Valeo.



Chaîne de conception et de développement de système de contrôle du groupe motopropulseur.

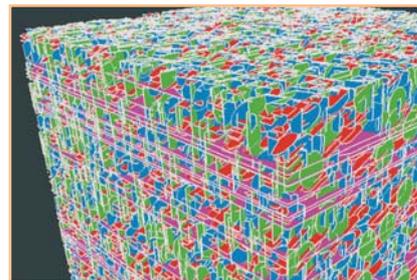
# Homogénéisation d'un milieu rocheux fracturé

La simulation numérique de l'écoulement des fluides dans les roches d'un réservoir pétrolier ou d'un stockage de gaz requiert des informations à différentes échelles sur leurs propriétés hydrauliques, et notamment sur leur perméabilité. Dans le cas des réservoirs fracturés, cette grandeur physique est liée aux caractéristiques du réseau de fractures discernables à une échelle bien inférieure à celle de la taille de la maille d'une grille de modèle réservoir.

Fournir des outils d'analyse des données de puits pour mieux contraindre la détermination des propriétés géométriques et hydrauliques du réseau de fractures et en déduire la perméabilité macroscopique du volume traversé par ce réseau est l'un des objectifs du logiciel *FracFlow* développé par l'IFP.

Des méthodes récentes permettent d'estimer la perméabilité sans recourir à des représentations stochastiques. Ainsi, la théorie des milieux effectifs a notamment permis de rendre compte de la présence simultanée de micro-fractures et de longues fractures faiblement espacées dans un cadre anisotrope quelconque. La méthode fournit une estimation du seuil de percolation dans le cas de micro-fractures seules.

Au-delà, cette méthode permet d'estimer d'autres propriétés : élastiques (qui peuvent être reliées à des attributs sismiques), thermiques ou électriques. En calant le modèle sur plusieurs types de données, on minimisera ainsi l'incertitude sur les caractéristiques du réseau de fractures, pour améliorer l'exploitation du réservoir. ■



Réalisation stochastique d'un réseau de fractures réaliste.

Barthélémy J.-F., *Effective permeability of media with a dense network of long and micro fractures*, accepted for publication in *Transport in porous media*, 2008. DOI : 10.1007/s11242-008-9241-9

Barthélémy J.-F., 2007, *Mechanical and hydraulic effective properties of an anisotropic fractured medium*, in *Particle and continuum aspects of mesomechanics*, pp. 805-812. ISBN: 9781847040251.

contact scientifique :  
j-francois.barthelemy@ifp.fr

Photos : © IFP, X

## Distinctions

• **Alain-Yves Huc**, adjoint au directeur de la direction Géologie - Géochimie - Géophysique et Professeur IFP, a reçu un "Honorable Recognition Award" au titre de son action comme "distinguished lecturer" dans le cadre du programme "Student Lecture Tours" de l'EAGE.

• **Denis Guillaume** a obtenu le prix de la division Catalyse de la Société française de chimie 2008 pour son activité de recherche menée depuis 1999 dans différents domaines de la catalyse hétérogène.

• **Pierre Duret**, directeur du centre Moteurs et Utilisation des hydrocarbures à l'École du pétrole et des moteurs, a reçu le 9 avril dernier la médaille de la reconnaissance de la Société des ingénieurs de l'automobile (SIA).

• **Ludovic Métivier**, **Florence Delprat-Jannaud** et **Patrick Lailly**, de l'IFP, et **Laurence Halpern** (Université Paris XIII - Villetaneuse) ont obtenu un prix lors du congrès CANUM (Congrès d'analyse numérique - Mai 2008), décerné par la Société de mathématiques appliquées et industrielles (SMAI) pour leur poster intitulé "Inversion 2D de données sismiques de puits".

• **Philippe Ungerer**, directeur scientifique de l'IFP, a été nommé chevalier de l'Ordre national du mérite, par décret du président de la République en date du 30 janvier, sur proposition du ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche.

## Divers

• Le 13 février 2008 a été créé le **prix de thèse Gérard de Soete**, dédié aux travaux de recherche sur la cinétique chimique de la combustion. Ce prix sera remis tous les deux ans en hommage à cet ancien chercheur de l'IFP, cofondateur du Groupement français de combustion (GFC).

• **Pascal Barthélémy** a rejoint l'IFP le 5 mai en tant que Directeur général adjoint. Il est titulaire d'un doctorat de physico-chimie et était directeur des Relations extérieures, Valorisation, en charge du Développement durable pour la fonction R&D chez Rhodia. Par ailleurs, Pascal Barthélémy a été le président fondateur du pôle de compétitivité Chimie-Environnement Lyon et Rhône-Alpes (Axelera).

## Nominations au Conseil scientifique de l'IFP

En tant que conseillers :

- **Sébastien Candé**, École Centrale de Paris
- **Guy Marin**, Université de Gand (Belgique)

En tant que membres experts :

- **Paul Colonna**, INRA
- **Philippe Sautet**, ENS Lyon
- **J. M. Tarascon**, Université de Picardie, Académie des Sciences

## Rencontres scientifiques de l'IFP

• **Advances in hybrid powertrains**  
25-26 novembre 2008, IFP, Rueil-Malmaison  
Contact organisation : frederique.leandri@ifp.fr  
Contacts scientifiques : francois.badin@ifp.fr et antonio.sciarretta@ifp.fr

• **Deep Saline Aquifers for CO<sub>2</sub> and Energy Storage**  
27-29 mai 2009, IFP, Rueil-Malmaison  
Contact organisation : frederique.leandri@ifp.fr  
Contact scientifique : etienne.brosse@ifp.fr

## Ouvrage

**A. Rojey** - *Énergie et climat - Réussir la transition énergétique*, aux Éditions Technip  
ISBN 978-2-7108-0908-1

**Directeur de la publication** : Marco De Michelis  
**Rédacteur en chef** : Philippe Ungerer  
**Comité éditorial** : Didier Espinat, Laurent Forti, Yolande Rondot.  
**Conception graphique** : Esquif  
N° ISSN : 1957-3537

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