

# Science@ifp

N°5 - Mai 2009

## Mieux choisir un solvant pour capter le CO<sub>2</sub>



*Afin de mieux valoriser l'excellence technique et scientifique de ses chercheurs et promouvoir*

*efficacement celle-ci auprès de ses partenaires industriels, institutionnels et académiques, l'IFP a créé récemment une filière d'expertise R&D. Le corps des experts IFP compte actuellement 6 Directeurs Experts et 21 Experts.*

*Ce Numéro 5 de "Science@ifp" fait une large part à des travaux initiés et animés par certains de nos experts. À l'avenir, nous retrouverons souvent les membres de ce corps parmi nos auteurs, mais aussi de futurs experts, puisque la raison d'être de cette lettre d'information est de signaler les résultats scientifiques les plus significatifs, issus de nos programmes R&D, sans omettre d'éclairer leur importance technologique.*

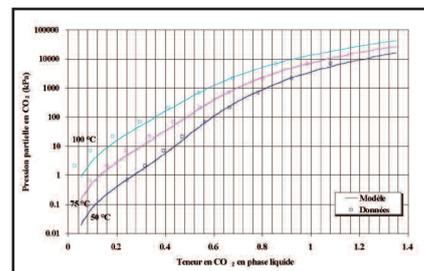
*Hervé Toulhoat  
Adjoint au Directeur scientifique*

Le captage du CO<sub>2</sub> contenu dans les fumées industrielles (issues des centrales thermiques, aciéries, cimenteries, etc.) est un impératif pour la maîtrise des émissions de gaz à effet de serre. Les procédés de captage actuellement envisagés consistent en une absorption du CO<sub>2</sub> par un solvant basique d'amine qui permet d'épurer les fumées tandis que le solvant est régénéré à haute température pour être recyclé.

Une large part du coût du captage provient de l'énergie à fournir pour régénérer le solvant et de nombreux travaux sont en cours de par le monde pour définir un solvant de captage économique. Sans omettre les problèmes de cinétique chimique ou de stabilité du solvant, le comportement thermodynamique de celui-ci en présence de CO<sub>2</sub> est l'un des principaux critères de l'évaluation technico-économique d'un procédé.

La caractérisation expérimentale d'un nouveau solvant consiste à mesurer les quantités absorbées et les chaleurs d'absorption du CO<sub>2</sub> dans le solvant à différentes pressions. Ces données thermodynamiques sont ensuite intégrées dans un même modèle réactionnel. Cette démarche permet de s'assurer de la cohérence des différentes données et d'accroître les capacités

prédictives du modèle. Il est ainsi possible de déterminer le profil des espèces en phase liquide lors du chargement de la solution, ce qui aide à la compréhension des mécanismes de captage. Cette démarche, mise en œuvre avec succès pour différentes alcanolamines (MEA, DEA, MDEA), est appliquée à de nouveaux solvants en cours de développement. ■



*Quantité de CO<sub>2</sub> absorbée par le solvant en fonction de la pression partielle et de la température. Comparaison modélisation / expérimentation.*

*E. Blanchon Le Bouhelec, P. Mougin, A. Barreau, R. Solimando, Rigorous modelling of the acid gas heat of absorption in alkanolamine solutions, Energy & Fuels, 2007, 21, 2044-2055 - DOI: 10.1021/ef0605706.*

*A. Barreau, E. Blanchon Le Bouhelec, K. Habchi Tounsi, P. Mougin, F. Lecomte, Absorption of H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub> in alkanolamine aqueous solution: Experimental data and modelling with the electrolyte-NRTL model, Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, 2006, 61(3), 345-361 - DOI: 10.2516/ogst:2006038a.*

**contact scientifique :**  
pascal.mougin@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.

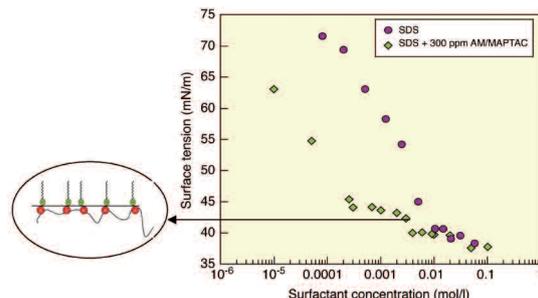
# Stabilisation d'émulsions et de mousses aqueuses

Les polymères et les tensioactifs sont utilisés dans de nombreux domaines, en particulier pour contrôler la stabilité et la rhéologie de systèmes colloïdaux, comme les émulsions ou les mousses. Toutefois, il est primordial de contrôler les interactions entre ces deux constituants afin que leur combinaison n'altère pas les propriétés macroscopiques de la formulation. De plus, des synergies peuvent être recherchées entre ces deux types d'additifs pour optimiser le système en termes de performances et de coût. Dans ce cadre, la combinaison de polymères et de tensioactifs de charges opposées est une voie novatrice et intéressante.

À partir de l'analyse des propriétés interfaciales de ces systèmes réalisée en collaboration avec l'université d'Orsay, il a été montré que l'addition d'une faible concentration d'un polyélectrolyte de charge opposée à un tensioactif ionique permettait de former et de stabiliser une émulsion ou une mousse, pour des

concentrations en tensioactif très faibles, typiquement inférieures à la Concentration Micellaire Critique. Cette stabilisation s'explique par la coadsorption de molécules de polymère et tensioactif à l'interface fluide/fluide et par la formation d'un complexe polymère/surfactant ayant une forte activité interfaciale.

De plus, la complexation et donc la stabilité de l'émulsion ou de la mousse aqueuse peut être modulée en jouant sur l'attraction électrostatique entre les deux espèces chargées. Des formulations à base de polyampholytes ou de tensioactifs amphotères peuvent donc être utilisées comme des systèmes sensibles au pH pour contrôler la stabilité ou le cassage d'émulsions ou de mousses aqueuses. Dans une perspective de développement durable, des formulations à base de polymères naturels biodégradables pourraient être ainsi développées. ■



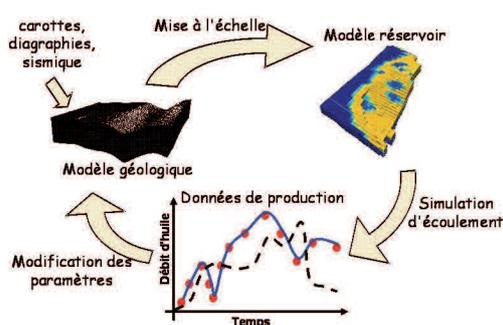
Tension interfaciale du tensioactif anionique (SDS) seul et du couple tensioactif anionique et polymère cationique (AM/MAPTAC), avec formation (en encart) d'un complexe polymère/tensioactif fortement actif au niveau de l'interface.

A. Asnacios, D. Langevin, J.F. Argillier, Complexation of cationic surfactant and anionic polymer at the air-water interface, *Macromolecules*, 29, 23, pp. 7412-7417, 1996. DOI 10.1021/ma960225n.

J.F. Argillier, S. Zeilinger, P. Roche, Enhancement of aqueous emulsion and foam stability with oppositely charged surfactant/polyelectrolyte mixed systems, *Oil & Gas Science and Technology - Rev IFP*, à paraître Mai 2009.

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

## Réconcilier modèles de réservoirs et données de production



Méthodologie de calage.

Afin d'optimiser la récupération d'hydrocarbures, l'IFP développe une méthodologie de modélisation contrainte des réservoirs par calage des données dynamiques. L'objectif est d'élaborer des modèles géologiques vérifiant toutes les données collectées : les données statiques comme des mesures sur carottes, et les données dynamiques

comme des débits ou des variations temporelles d'attributs sismiques (sismique 4D).

La méthode comprend essentiellement deux phases : la définition d'une séquence d'activités et le calage des données dynamiques. Une séquence d'activités est une suite d'opérations qui permet de passer du modèle géologique à des réponses en production. Elle inclut, par exemple, une étape de modélisation des propriétés physiques à l'échelle du modèle géologique, de mise à l'échelle vers un modèle réservoir plus grossier et de simulation d'écoulement pour obtenir des réponses en production.

Le modèle de réservoir ainsi obtenu a une valeur prédictive si les réponses simulées reproduisent les données dynamiques. Il s'agit donc de minimiser

la fonctionnelle mesurant l'écart entre les résultats simulés et les données. L'intégration de données dynamiques de natures différentes, comme la sismique 4D en sus des données de production, pose des difficultés incomplètement levées à ce jour. Ce sujet fait l'objet du consortium de recherche MC2. Par ailleurs, la méthodologie mise en place a inspiré le logiciel IFP *CondorFlow* commercialisé par Beicip-Franlab. ■

M. Le Ravalec, B. Noetinger, L.Y. Hu, The FFT moving average (FFT-MA) generator: an efficient numerical method for generating and conditioning Gaussian simulations, *Math. Geol.*, 32(6), 701-723, 2000.

F. Roggero, D.Y. Ding, P. Berthet, O. Lerat, J. Cap, P.E. Schreiber, Matching of production history and 4D seismic data - Application to the Girassol field, offshore Angola, SPE ATCE, Anaheim, CA, USA, SPE 109929, 2007.

contact scientifique :  
mickaele.le-ravalec@ifp.fr

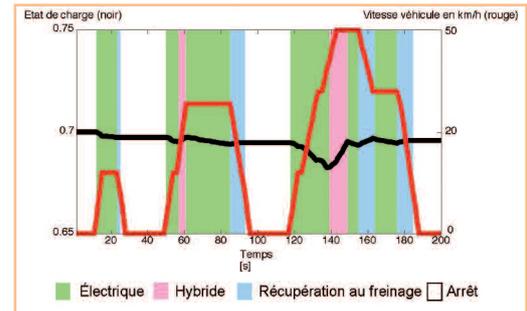
# Gestion optimale de l'énergie dans les véhicules hybrides

Le véhicule hybride existe depuis plus d'un siècle. Pourtant, ce n'est que récemment que ses potentialités en termes d'autonomie et de réduction des émissions de CO<sub>2</sub> ont été exploitées. Parmi les facteurs clé de ce succès, un rôle très important est attribué à la gestion des flux d'énergies à bord. Il s'agit d'une problématique de contrôle complexe, mais qui est normalement traitée avec des lois de gestion heuristiques, calibrées au cas par cas. Un pas en avant vers des gestionnaires de l'énergie généraux, tout en restant performants, peut être réalisé grâce à l'optimisation mathématique.

Sur la base de critères judicieux d'optimisation (consommation de carburant, émissions, autonomie, etc.) et de contraintes (durée de vie de la batterie, agrément de conduite, etc.), les chercheurs IFP développent des outils originaux qui calculent les lois optimales de gestion de l'énergie sur un profil de

conduite donné. Les outils s'appliquent à toute architecture de véhicule hybride et se fondent sur le Principe du Minimum de Pontriaguine (PMP). À l'inverse de la plupart des techniques d'optimisation existantes, comme la Programmation Dynamique, le noyau des lois résultant du PMP est directement applicable à bord, même si le cycle de conduite n'y est pas connu à l'avance, grâce à l'estimation en ligne d'un paramètre inconnu.

Ces techniques innovantes sont validées à l'aide du système "HyHiL", moyen d'essai semi-virtuel dédié aux hybrides, développé dans le cadre d'un projet financé par le Fonds Unique Interministériel. Les essais ont montré que le contrôle en ligne permettait d'exploiter au mieux les degrés de liberté disponibles. À présent, les travaux visent à étendre les méthodes d'optimisation, par exemple à la gestion de la thermique et à la récupération d'énergie au freinage. ■



Évolutions optimales de la charge de la batterie et du mode de fonctionnement en fonction de la vitesse du véhicule.

L. Guzzella, A. Sciarretta, *Vehicle propulsion systems: Introduction to modeling and optimization*, 2nd edition, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2007, ISBN 3540746919.

A. Sciarretta, L. Guzzella, *Control of hybrid electric vehicles: Optimal energy-management strategies*, *Control Systems Magazine*, vol. 27, no. 2, April 2007, pp. 60-70. DOI: 10.1109/MCS.2007.338280.

contact scientifique :  
antonio.sciarretta@ifp.fr

## Visualiser les hydrocarbures imbrûlés dans les moteurs Bas NOx

Le développement des nouveaux modes de combustion diesel à basse température, permettant notamment l'obtention de très faibles niveaux d'oxydes d'azote et de suies, est freiné par le fait que ce type de combustion peut aussi générer des émissions importantes d'hydrocarbures imbrûlés. C'est pourquoi l'IFP a réalisé une étude pour mieux appréhender les phénomènes concernés et proposer des voies d'amélioration.

Pour cela, des mesures ont été réalisées sur moteur "transparent" en utilisant différentes techniques de fluorescence induite par laser spécifiquement mises au point afin de visualiser aussi bien les zones de formation d'hydrocarbures imbrûlés que les dépôts de film liquide sur la paroi du piston. Ces mesures ont été couplées à des résultats de variations paramétriques sur moteur opaque incluant des changements de configuration moteur. Ainsi, deux mécanismes prépondérants ont été identifiés : le *quenching* de

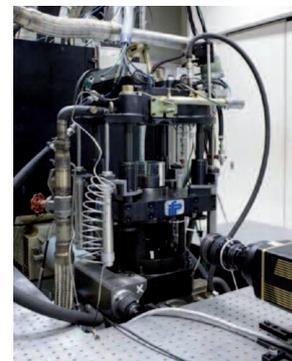
masse (défaut de température de cycle ou de richesse locale, responsable de réactions incomplètes) et la formation de film liquide sur la paroi du piston pour certaines stratégies d'injection.

L'application de techniques de mesure par fluorescence a aussi permis de comprendre comment le film liquide déposé sur la surface du piston se décolle de ce dernier au cours de la phase de détente suite à un phénomène de *flash-boiling*, émettant ainsi des hydrocarbures imbrûlés à l'échappement du moteur. ■

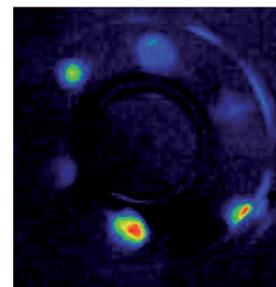
J. Kashdan, G. Bruneaux, *Mixture preparation and combustion in a optically-accessible HCCI diesel engine*, *Oil & Gas Science and Technology - Rev IFP*, vol. 61, n° 1, pp. 25-42, 2006.

J. Kashdan, G. Bruneaux, *An investigation of unburned hydrocarbon emissions in wall-guided, low temperature diesel combustion*, *Oil & Gas Science and Technology - Rev IFP*, vol. 63 n° 4, pp.433-459, 2008.

contact scientifique :  
gilles.bruneaux@ifp.fr



Moteur optique utilisé pour les essais.



Visualisation des films liquides formés sur la surface du piston par fluorescence induite par laser au travers du piston transparent.

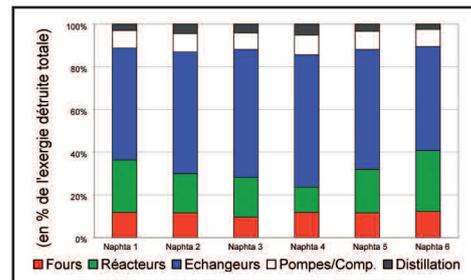
# Analyse exergetique et développement durable de procédés

Afin de proposer des procédés de transformation de la matière efficaces et respectueux de l'environnement, il est primordial de pouvoir intégrer au plus tôt dans leur développement les contraintes d'émissions de gaz à effet de serre (GES) et de raréfaction des ressources. L'impact environnemental d'un procédé peut être déterminé par Analyse de Cycle de Vie (ACV), qui requiert un niveau de détail qui n'est pas disponible lors de la phase de conception préliminaire du procédé. Pour une estimation qualitative, on utilise une ACV simplifiée, qui fournit une valeur moyenne d'émission de GES pour différents types d'utilités (eau, vapeur, électricité, etc.).

L'exergie, fonction thermodynamique qui lie l'enthalpie, l'entropie et une référence

à un environnement standard, représente la partie "utile" de l'énergie d'un fluide. Ainsi, plus on détruit d'exergie, plus on perd de l'énergie utile. Les points à améliorer dans un procédé peuvent ainsi être mis en évidence en déterminant les destructions d'exergie dans chaque opération unitaire. En couplant l'analyse exergetique et l'ACV simplifiée, on remarque que les émissions de GES augmentent avec l'exergie détruite. On détermine ainsi quels éléments du procédé sont les plus responsables de son impact environnemental.

Les travaux en cours visent à intégrer à l'analyse précédente la notion de valeur des flux produits par le procédé, afin d'obtenir un indice qui guidera le développement vers un procédé économique-



Exergie détruite par type d'opération unitaire dans un procédé de reformage catalytique.

ment viable et respectueux de l'environnement. ■

J.F. Portha, J.N. Jaubert, S. Louret, M.N. Pons, Definition of a thermodynamic parameter to calculate carbon dioxide emissions in a catalytic reforming process, Int. J. of Thermodynamics. Vol.11 (2), pp.81-89, June 2008.

contact scientifique :  
sylvain.louret@ifp.fr

## Nominations

• **Christian Angelberger**, Expert IFP, a été nommé le 16 septembre 2008, par le ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, membre de la section 10 (Milieux fluides et réactifs : transports, transferts, procédés de transformation) du CNRS.

• **François Roure**, Expert IFP en Géologie structurale, a été reconduit dans ses fonctions au Comité des publications de l'AAPG (American Assoc. of Petroleum Geologists).

## Collaborations

• **L'IFP, le CNRS et l'ENS-Lyon** lancent un projet de recherche en modélisation moléculaire pour la catalyse avec la King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), centre universitaire et de recherche international en cours de construction en Arabie Saoudite.

• **L'IFP et le BRGM** ont signé un accord de partenariat de recherche dans le domaine de la modélisation des stockages de CO<sub>2</sub>, articulé autour du logiciel IFP de simulation Coores™ et s'appuyant sur leurs compétences et expertises complémentaires.

## Ouvrage

"La nouvelle donne du charbon"  
F. Kalaydjian, S. Cornot-Gandolphe  
Éditions Technip - ISBN : 9782710809265.

## Distinctions

• **Prix Yves Chauvin 2008** : le Prix de thèse IFP a été attribué à Antoine Fécant pour son travail intitulé : "Synthèse de nouvelles zéolithes possédant des ouvertures de pores à 10 et 12 atomes tétraédriques".

• **Marc Fleury**, de la direction Ingénierie de réservoir, a obtenu le prix Darcy 2008, plus haute distinction de la Society of Core Analysis, pour ses travaux en pétrophysique.

• **Caroline Chaux** est lauréate du Prix de thèse 2008 du Club des enseignants et des chercheurs en électronique, électrotechnique et automatique pour sa thèse "Analyse en ondelettes M-bandes en arbre dual ; application à la restauration d'images", menée sous la direction de J.-C. Pesquet (université Paris-Est) et L. Duval (IFP).

## Chaires à IFP School

• **Philippe Joseph**, Expert IFP, est titulaire de la chaire "Sédimentologie et caractérisation des réservoirs" soutenue par Total.

• **Antonio Sciarretta**, Expert IFP, s'est vu confier la chaire "Véhicules hybrides et contrôle de l'énergie" (janvier 2009).

## Habilitations à diriger les recherches

• **Gilles Bruneaux**, Expert IFP, HDR de l'université d'Orléans : "Investigation expérimentale de la structure du jet diesel et sa combustion" (25 juin 2008).

• **Gerhard Pirngruber**, HDR de l'université Claude Bernard Lyon 1 : "Décomposition du N<sub>2</sub>O et synthèse de catalyseurs biomimétiques" (11 décembre 2008).

## Congrès scientifiques à l'IFP

• **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

• **IFAC Workshop on Engine and Powertrain Control, Simulation and Modeling**

30 novembre - 2 décembre 2009,  
IFP, Rueil-Malmaison  
Contact organisation : bettina.caruso@ifp.fr  
Contact scientifique : paolino.tona@ifp.fr

• **La Conférence AAPG-European Region** sera hébergée par l'IFP à Rueil-Malmaison les 23 et 24 novembre 2009.

## ANR

• **L'IFP a été retenu par l'ANR** comme organisme support du programme VTT (Véhicules pour les transports terrestres), qui vise l'efficacité énergétique des véhicules, la réduction de leurs émissions et l'efficacité des systèmes de transport.

**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