

Science@ifpen

N° 26 - Octobre 2016

NUMÉRO SPÉCIAL
Modélisations multiphysiques
et multi-échelles



Beaucoup de problèmes complexes dont la résolution était encore inaccessible, il y a peu, sont désormais à la portée de la simulation multi-échelle grâce à l'essor du calcul intensif. Une combinaison extraordinairement efficace de nouvelles idées, de modèles physiques avancés, de méthodes de discrétisation et de résolution, ainsi que de moyens informatiques de plus en plus puissants est ainsi disponible.

Cette révolution, rendue possible par les performances du calcul parallèle, conduit par exemple à obtenir en un mois le résultat de calculs d'un million d'heures CPU (un siècle). Il s'agit d'un progrès considérable pour la capacité à déployer une modélisation sophistiquée, utile aussi bien à la conception de systèmes techniques complexes qu'à la simulation de phénomènes physiques en interaction.

Ce numéro donne un aperçu du développement à IFPEN de la modélisation des phénomènes couplés, dans une perspective de changement d'échelle, et sur sa mise en œuvre dans différents domaines.

Bonne lecture,

Sébastien Candell,
Ancien président du Conseil scientifique
d'IFPEN
Vice-président de l'Académie des sciences

Les suies « sectionnées » pour un air moins pollué

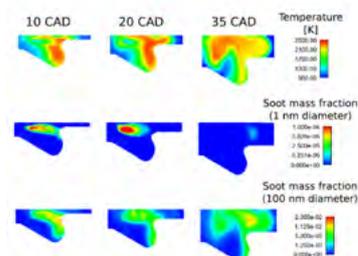
La capacité des chercheurs à comprendre et à prédire la formation des polluants émis par les véhicules est un enjeu clé pour la mobilité durable. En effet, ces connaissances sont essentielles à la fois pour réduire les émissions à la source et pour optimiser les systèmes de post-traitement.

Dans ce cadre, les particules émises par les moteurs Diesel constituent un défi majeur en termes de modélisation car ces émissions sont réglementées aussi bien au plan quantitatif que qualitatif. Ainsi, pour être utiles, les modèles doivent pouvoir prédire, en plus d'une masse globale, le nombre et la taille des particules de suies émises par les moteurs, qui plus est en fonction de la composition du carburant ou du profil d'utilisation du véhicule. De tels modèles sont d'un développement complexe car ils font appel aux modélisations les plus abouties de la chimie de la combustion et de la combustion turbulente.

Cette difficulté a néanmoins été surmontée par IFPEN. Le modèle mis au point par ses chercheurs a été implémenté dans un code 3D de simulation moteur. Grâce à un regroupement des suies selon leurs tailles (approche dite « sectionnelle »¹), le modèle¹ décrit l'évolution de la distribution des suies en taille, en prenant en compte les collisions et les échanges avec le mélange gazeux (dont l'oxydation). Ces échanges faisant appel à une chimie complexe,

leur traitement repose sur des approches tabulées² pour alléger les calculs.

Pour les moteurs Diesel, il est donc désormais possible de simuler la combustion dans la chambre en incluant une représentation fine des particules formées à chaque instant. Les modèles développés intéressent à la fois l'industrie automobile et l'industrie aéronautique, où ils vont être intégrés à un code de simulation des chambres de combustion aéronautiques.



Cartographie de température et de deux tailles de suies modélisées dans un cylindre Diesel.

a - approche où chaque classe de tailles de suies est décrite au travers d'une équation de transport spécifique

[1] D. Aubagnac-Karkar, J.-B. Michel, O. Colin, P.E. Vervisch-Kljakic, N. Darabiha, *Combust. Flames*, 2015, 162, 3081-3099.
DOI : 10.1016/j.combustflame.2015.03.005

[2] J.-B. Michel, O. Colin, *Int. J. Engine Res.*, 2013, 15, 346-369.
DOI : 10.1177/1468087413488590

Contact scientifique :
jean-baptiste.michel@ifpen.fr

IFP Energies nouvelles (IFPEN) est un acteur majeur de la recherche et de la formation dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. De la recherche à l'industrie, l'innovation technologique est au cœur de son action.



Pour un meilleur arrosage des lits fixes

Éliminer des carburants les impuretés comme le soufre ou l'azote, ou augmenter le rendement de production d'essence ou de gazole, sont des enjeux importants pour l'industrie du raffinage. La technologie de réacteurs catalytiques à lit fixe arrosé contribue à relever ces défis *via* des procédés comme l'hydrotraitement de coupes pétrolières ou d'huiles végétales.

Aujourd'hui, le développement des modèles de CFD^a et l'accroissement des potentiels de calcul par le HPC^b permettent de simuler des réacteurs industriels polyphasiques toujours plus complexes. En couplant l'hydrodynamique à la cinétique de réaction, ces simulations permettent de prédire les performances des réacteurs, en intégrant l'impact de la distribution des fluides en tête de lit.

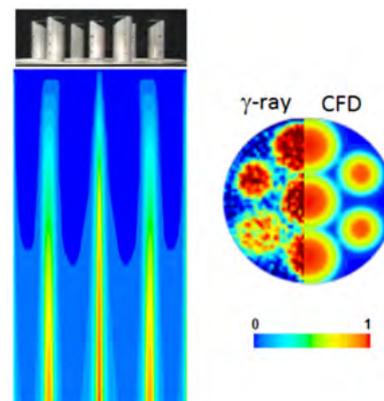
Le modèle hydrodynamique 3D, récemment développé à IFPEN, se base sur une description, moyennée en espace, des interactions entre phases (modèle eulérien à deux fluides en milieu poreux). Les lois physiques impliquées dans le bilan de quantité de mouvement sont issues de développements internes (frictions

entre phases, pression capillaire) et de la littérature (dispersion mécanique).

Ce modèle a été validé avec succès sur plusieurs cas expérimentaux, dont un conduit sur une maquette équipée d'un dispositif d'analyse par tomographie- γ , mobile suivant la hauteur et donnant accès aux distributions des fluides selon différentes sections (cf. figure). Il a ensuite été couplé à un modèle cinétique de craquage catalytique, pour déterminer l'impact de la distribution sur les performances globales et ainsi proposer des cibles quantitatives pour les futures technologies de distributeurs.

Par ailleurs, afin de limiter les temps de calcul et être incorporable si besoin dans des simulateurs mettant en œuvre des schémas cinétiques détaillés, le modèle a été réduit à un équivalent « 1D-multisorties », paramétré à partir de simulations CFD préliminaires.

Les futurs travaux sur ce modèle consisteront à prendre en compte les limitations hydrodynamiques et diffusionnelles liées notamment au mouillage partiel des catalyseurs. ■



Saturation en liquide dans un lit catalytique : simulations et données expérimentales.

a - Computational Fluid Dynamics
b - High Performance Computing

[1] Augier et al., *CJCE*, 2016.
DOI : 10.1002/cjce.22618

[2] Solomenko et al., *CES*, 2014.
DOI : 10.1016/j.ces.2015.01.013

Contacts scientifiques :
manel.fourati@ifpen.fr
frederic.augier@ifpen.fr

Modélisation de bassin : du brut au menu des micro-organismes

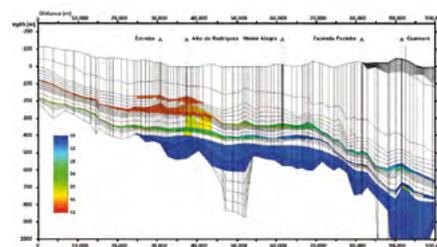
La modélisation des bassins sédimentaires est utilisée pour localiser et déterminer la qualité des futurs champs pétroliers, dans une phase d'exploration, contribuant ainsi à réduire, avant forage, les risques et les coûts de production. La qualité des hydrocarbures présents dans ces champs dépend également d'un autre facteur, qui jusqu'à une période récente n'était pas pris en compte : son altération par des micro-organismes. Ces derniers, présents dans les réservoirs pétroliers peu enfouis, consomment en effet préférentiellement les composants légers.

Ceci engendre une baisse de la valeur économique du champ et une difficulté de production accrue au plan technique, car le pétrole y est alors plus dense, plus visqueux et souvent plus acide. La prédiction de l'altération microbienne des hydrocarbures est donc cruciale avant la phase d'exploration.

De récents travaux, associant géologues, géochimistes et microbiologistes d'IFPEN,

ont conduit à prendre en compte les effets de cette biodégradation dans les modèles de bassin. Les résultats, obtenus par cette approche multiphysique et intégrés dans le logiciel de modélisation de bassin TemisFlow™, ont notamment été appliqués sur le bassin de Potiguar (Brésil) où ils ont permis de mieux décrire les phénomènes de remplissage et d'altération du pétrole dans les champs¹.

Cet enrichissement de la modélisation de bassin apporte aussi de nouveaux outils de compréhension ; ils permettent, par exemple, d'expliquer l'origine d'importants champs de gaz découverts en Méditerranée. En s'appuyant sur des données acquises dans le cadre du consortium Pamela^a, la nouvelle composante microbiologique du modèle pourra étayer l'hypothèse selon laquelle les micro-organismes auraient dégradé la matière organique solide enfouie, avant sa transformation en pétrole. ■



Vue en coupe du bassin de Potiguar : prédiction de la densité des hydrocarbures piégés dans la formation géologique.

a - Passive Margins Exploration Laboratories : projet piloté par Ifremer, avec le soutien de Total, IFPEN et les universités de Brest, Rennes et Paris VI

[1] M. Ducros, B. Carpentier, S. Wolf et M.C. Cacas, *Journal of Petroleum Geology*, Vol. 39(1), Janvier 2016, pp 61-78.
DOI : 10.1111/jpg.12628

Contact scientifique :
mathieu.ducros@ifpen.fr

Du multiphysique sur toute la ligne

La mise au point de systèmes plus performants pour la dépollution des gaz d'échappement automobiles est un levier pour améliorer la qualité de l'air en milieu urbain. La conception de systèmes de plus en plus sophistiqués tire parti de simulations couplant des modèles de dynamique des fluides multiphasiques et de réactivité chimique.

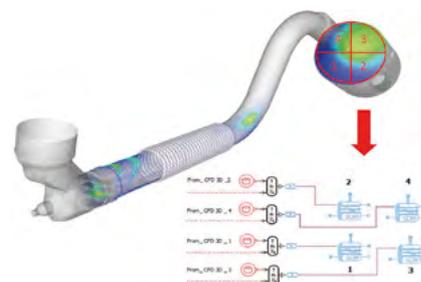
Un exemple emblématique est le système de réduction catalytique sélective (ou SCR) des oxydes d'azote (NOx) dans lequel un mélange urée/eau, injecté en amont du catalyseur, se décompose en une variété de produits. L'optimisation de cette décomposition est un enjeu majeur pour que la totalité des espèces réductrices soit disponible au niveau du catalyseur et assure une conversion maximale des NOx. Une mauvaise décomposition entraîne, en outre, la formation de dépôts qui encrassent la ligne d'échappement et diminuent encore l'efficacité du système de dépollution.

Depuis plusieurs années, IFPEN a développé un modèle unique¹ couplant

l'évaporation de solutions d'urée, l'interaction de leur spray avec la paroi, la décomposition de l'urée et la formation de dépôts dans des configurations réalistes (cf. figure). Ce modèle a été implanté dans le code 3D de combustion multiphasique Converge™ développé par notre partenaire Convergent Science. La qualité de cette modélisation assure la complémentarité des deux modèles grâce à une spécification précise des conditions à l'entrée du catalyseur, tout en minimisant le « coût calcul » de la simulation numérique dans la zone catalytique.

Le modèle a ensuite été couplé au modèle IFPEN de catalyseur² disponible sur la plateforme de simulation système LMS Imagine.Lab Amesim™^a.

Cette combinaison de deux codes permet d'évaluer de façon rapide et précise le potentiel de réduction des NOx par une ligne de post-traitement donnée, tout en tenant compte de l'éventuelle apparition de dépôts et des inhomogénéités dans la composition des gaz d'échappement. ■



Couplage entre modélisation multiphysique 3D et 0D pour étudier les dépôts et dimensionner un système SCR.

a - Integrated simulation platform for multi-domain mechatronic systems simulation

[1] V. Ebrahimiyan, A. Nicolle, C. Habchi, *AIChE Journal*, 2012, 58(7), 1998-2009. DOI : 10.1002/aic.12736

[2] S. Dosda, D. Berthout, G. Mauviot, A. Nogue, *SAE Technical Paper*, 2016-01-2281. DOI : 10.4271/2016-01-2281

Contact scientifique :
chaouki.habchi@ifpen.fr

On a souvent besoin d'une plus petite échelle

Les milieux poreux géologiques, même homogènes à grande échelle, peuvent présenter une forte hétérogénéité à l'échelle microscopique (de la taille du pore à quelques milliers de pores). Or, le comportement des fluides à grande échelle est significativement dépendant de cette structure microscopique. C'est pourquoi la modélisation et la simulation des écoulements et du transport en milieu poreux nécessitent des caractérisations structurales fines de la roche. Pour cela, IFPEN s'appuie sur l'observation d'échantillons en imagerie de haute résolution : des techniques d'imagerie à rayons X (microtomographie), mises en œuvre à la fois à IFPEN et au synchrotron de Grenoble (ESRF), donnent accès à une connaissance de la structure du milieu poreux avec une résolution allant de 0,3 à 3 μm.

À partir de ces observations, deux méthodes sont utilisées pour simuler l'écoulement et le transport dans le milieu poreux :

- la méthode Lattice Boltzmann, méthode directe qui utilise un maillage correspondant à la discrétisation en espace de l'image obtenue,

- la modélisation *Pore Network Modeling* (PNM), basée sur la résolution d'équations linéaires, qui décrit le transport dans un réseau, lui-même obtenu à partir d'un algorithme de squelettisation appliqué aux images.

L'importance de prendre en compte la structure de l'espace poreux dans la modélisation des propriétés à grande échelle a été démontrée dans le cas d'un paramètre largement employé pour estimer la saturation en huile d'un réservoir pétrolier : l'indice de résistivité, dont la détermination repose sur une loi empirique, dite loi d'Archie, reliant cette propriété à la saturation du milieu^a.

On a en effet observé expérimentalement¹ que cette loi n'était pas respectée pour certains types de roches carbonatées, lorsque la saturation en eau est faible. La simulation PNM a permis d'expliquer cette divergence et de proposer un modèle prédictif pour l'indice de résistivité. Ainsi, on montre que l'écart à la loi empirique augmente lorsque l'eau présente dans le milieu se réduit à des films couvrant les parois de la roche. ■

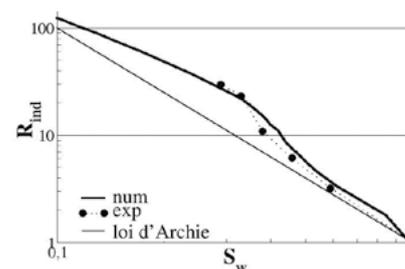


Image microtomographique d'une roche et comparaison mesure vs simulation de l'indice de résistivité.

a - $R_{ind} = S_w^2$ (R_{ind} étant l'indice de résistivité et S_w la saturation par le fluide)

[1] D. Bauer, S. Youssef, M. Han, S. Bekri, E. Rosenberg, M. Fleury, et O. Vizika, *Physical Review*, 2011. DOI : 10.1103/PhysRevE.84.011133

Contact scientifique :
daniela.bauer@ifpen.fr

À la recherche des passerelles entre échelles multiples et multi-échelle

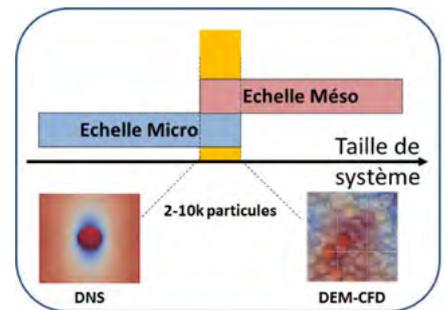
Que ce soit pour sa conception ou l'optimisation de son fonctionnement, simuler numériquement un réacteur chimique complet, avec une résolution fine et pertinente du point de vue des mécanismes en jeu, représente sans doute un objectif inatteignable avant plusieurs dizaines d'années, malgré l'évolution anticipée des puissances de calcul. En effet, une résolution de l'ordre de $1/30^e$ du diamètre équivalent de la plus petite des particules impliquées^a est alors requise et, à cette échelle que l'on nomme micro, un tel système numérique peut alors nécessiter une discrétisation géométrique impliquant jusqu'à 10^{15} cellules.

Ce constat a favorisé l'utilisation d'échelles de calcul méso et macro, avec des approches moyennées sollicitant beaucoup moins de ressources de calcul, mais requérant l'élaboration de modèles de « sous-maille » avec une prise en compte plus statistique et globale des phénomènes physiques à l'œuvre. L'élaboration d'une stratégie multi-échelle cohérente — décrivant et quantifiant l'information, nécessaire et suffisante, à transmettre d'une échelle

à l'autre pour une description plus réaliste des mécanismes physiques — est donc un enjeu important pour ces simulations.

Récemment, IFPEN a franchi un nouveau cap^b. Des simulations^b à l'échelle micro ont été effectuées, avec un coût de calcul raisonnable, sur un échantillon représentatif élémentaire d'environ 2 000 particules fluidisées. La comparaison directe entre les échelles micro et méso, ainsi rendue possible, a permis de valider et d'améliorer les modèles actuels^c, ainsi que les méthodologies de passage d'une échelle à l'autre.

Ces travaux prometteurs, appliqués pour l'instant à la description de l'hydrodynamique des écoulements fluide/particules, sont actuellement poursuivis *via* un projet de recherche collaboratif^c, en vue de bâtir une modélisation multi-échelle des écoulements particuliers réactifs. ■



Stratégie adoptée par comparaison directe des deux échelles : à gauche, micro avec une méthode DNS^d et à droite, méso avec une méthode DEM-CFD^d.

[1] A. Wachs, A. Hammouti, G. Vinay, M. Rahmani, *Computers & Fluids*, 2015, 154-172.
DOI : 10.1016/j.compfluid.2015.04.006

[2] A. Esteghamatian, M. Bernard, M. Lance, A. Hammouti, A. Wachs, soumis à *International Journal of Multiphase Flow*.

a - par exemple, des grains de catalyseur

b - www.peligriff.fr

c - www.more4less.fr

d - DNS : Direct Numerical Simulation

DEM-CFD : Discrete Element Method - Computational Fluid Dynamics

Contact scientifique :

abdelkader.hammouti@ifpen.fr

Actualité

La revue d'IFP Energies nouvelles OGST a recueilli 1 353 citations d'articles en 2015, permettant d'obtenir un facteur d'impact à deux ans de 1,087, en hausse par rapport à l'année 2014.

Nominations

• **Marie-Françoise Chabrelie**, chef de département à la direction Économie et Veille d'IFPEN, a été nommée directeur du consortium de valorisation thématique (CVT) de l'alliance Ancre.

• **Jean-François Gruson**, directeur expert de la direction Économie et Veille d'IFPEN, a été nommé au conseil scientifique et technique de l'appel à propositions de recherche Graine* de l'Ademe pour expertiser et opérer la sélection des projets qui seront retenus parmi les 99 dossiers déposés.

* Gérer, produire et valoriser des biomasses : une bioéconomie au service de la transition écologique et énergétique

Récompense

• **Carmen Claver**, membre du conseil scientifique d'IFPEN, a reçu le prix franco-espagnol de la Société chimique de France (SCF). Professeure de chimie inorganique à l'université Rovira i Virgili à Tarragone (Espagne), elle apporte à IFPEN son expérience dans la conduite de travaux scientifiques d'excellence dans les domaines de la chimie organo-métallique et de la catalyse homogène.

Publications

• OGST - Revue d'IFP Energies nouvelles - Numéro 3, volume 71 (2016). Numéro dédié aux méthodologies pour le développement de procédés à IFPEN.

• OGST - Revue d'IFP Energies nouvelles - Numéro 4, volume 71 (2016). Numéro dédié à la caractérisation et à la modélisation de milieux à faible perméabilité et de matériaux nanoporeux.

<http://ogst.ifpennergiesnouvelles.fr>

Prochains événements scientifiques

• Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles - **LES4ICE 2016 : la simulation aux grandes échelles pour les moteurs à combustion interne** - 30 novembre et 1^{er} décembre 2016, IFPEN Rueil-Malmaison - www.rs-les4ice.com

• Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles - **La chimie computationnelle pour réduire la pollution atmosphérique** - 13 et 14 mars 2017, IFPEN Rueil-Malmaison - www.rs-compchemistry.com

• **DEPOS27 : déformation des polymères solides** - 22 au 24 mars 2017, Dourdan - www.depos27.fr

Directeur de la publication : Marco De Michelis
Rédacteur en chef : Éric Heintz
Comité éditorial : Xavier Longaygue, Laurent Forti, Benjamin Herzhaft
Conception graphique : Esquif
N° ISSN : 1957-3537

Pour prendre contact avec IFP Energies nouvelles ou pour recevoir Science@ifpen :

Direction des Relations Institutionnelles et de la Communication
Tél. : +33 1 47 52 51 34 - Science@ifpen.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

Science@ifpen Numéro 26 • Octobre 2016

www.ifpennergiesnouvelles.fr

@IFPENinnovation

