



Science@ifpen

N° 10 - Octobre 2012



Selon une étude bibliométrique récente, IFP Energies nouvelles (IFPEN) se place parmi les dix premiers organismes mondiaux

en termes de publications scientifiques et de citations dans les domaines des contrôles moteur et groupe motopropulseur. Ce résultat reflète notre très bon positionnement à l'international et montre une large diffusion de nos recherches dans ces domaines.

Les travaux de recherche d'IFPEN en sciences et technologies numériques font l'objet de ce numéro spécial de Science@ifpen. Au-delà de questions directement liées aux problématiques automobiles, vous y trouverez des informations relatives à la simulation numérique du stockage du CO₂, la géométrie algorithmique en géosciences, le traitement d'images pour l'analyse de catalyseurs ou encore la simulation temps réel dans la conception de systèmes physiques complexes. Ces quelques exemples sont destinés à montrer tout le potentiel que nous offrent la modélisation et la simulation numériques dans nos différents domaines d'intervention, y compris la chimie numérique, les procédés, la combustion moteur, les géosciences, etc.

Bonne lecture,

Van Bui Tran,
Directeur de la direction Technologie,
Informatique et Mathématiques appliquées

Des batteries suivies de près

Soumis à des sollicitations dynamiques très sévères, le système batterie représente le composant le plus critique dans le véhicule électrifié. La maîtrise de son état de charge (SOC) et de son état de santé (SOH) est indispensable à la fois pour la gestion de l'ensemble du groupe motopropulseur et pour éviter la détérioration des prestations et de la durée de vie de la batterie.

Le SOC et le SOH ne sont pas directement mesurables à bord du véhicule. Une estimation précise et fiable à partir des mesures disponibles est donc nécessaire. Ce problème est difficile à traiter car d'une part, les cellules constituant le pack batterie sont le siège de phénomènes électrochimiques très complexes, et d'autre part, le pack batterie est peu instrumenté.

Les estimateurs d'état de charge sont communément basés sur l'intégration du courant dans le temps. Ils ont un caractère prédictif limité puisqu'ils ne sont pas capables d'estimer l'état initial, les surtensions et la puissance disponible. La solution proposée par les chercheurs d'IFPEN consiste à utiliser un filtre de Kalman étendu, capable d'estimer l'état interne de la cellule. Ce filtre est basé à la fois sur un modèle dynamique de la cellule et sur des mesures de tension et

de courant aux bornes de la batterie. L'approche retenue repose sur la modélisation de phénomènes électrochimiques par analogie électrique. Testé au banc HIL (*Hardware in the Loop*) d'IFPEN sur différentes technologies de batteries, ce filtre a montré de bonnes précisions de l'estimation de charge, de l'énergie et de la puissance disponibles. Ces niveaux de précision seront améliorés par des techniques de filtrage des erreurs non-gaussiennes, de mesure et de modélisation, comme par exemple le filtre particulaire. ■



Le banc HIL batterie d'IFPEN permet d'évaluer le comportement d'une batterie au sein d'un groupe motopropulseur complexe entièrement virtuel.

D. Di Domenico, A. Stefanopoulou, G. Fiengo,
Journal of Dynamic Systems, Measurement, and Control
(JDSMC), 2010, 132 (6). DOI : 10.1115/1.4002475

Contacts scientifiques :
domenico.didomenico@ifpen.fr
yann.creff@ifpen.fr

IFP Energies nouvelles est un organisme public de recherche, d'innovation et de formation dont la mission est de développer des technologies performantes, économiques, propres et durables dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement.



Le CO₂ simule son stockage

Pour un stockage géologique du CO₂ efficace et pérenne, il est essentiel de bien connaître et maîtriser les interactions chimiques pouvant avoir lieu entre le gaz, l'eau et la roche, au cours de l'opération d'injection puis durant la phase de stockage à long terme.

Les simulations numériques de ces interactions permettent d'évaluer les risques, mais aussi le potentiel de piégeage du CO₂ injecté.

Les difficultés rencontrées pour simuler le transport réactif sont nombreuses. Ainsi, les solveurs classiques ne permettent pas de résoudre les systèmes non linéaires comprenant des équilibres chimiques et des cinétiques de réaction raides. De plus, ces méthodes demandent un grand nombre d'itérations et les échecs successifs entraînent généralement des réductions importantes du pas de temps. Ces difficultés étant localisées dans une zone limitée du domaine de

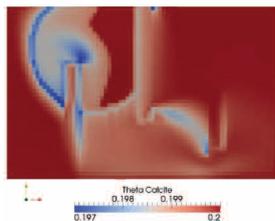
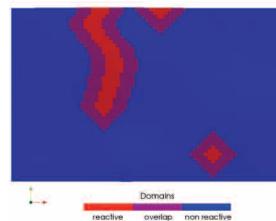


Image du front de dissolution de calcite (bleu) en bordure de la zone de stockage de CO₂.

simulation, une solution possible est d'isoler cette zone réactive. En collaboration avec le laboratoire Analyse, Géométrie et Applications (LAGA) de l'université Paris 13, les chercheurs d'IFPEN ont étudié une méthode de décomposition du domaine espace-temps, étendue aux systèmes d'équations aux dérivées partielles utilisés pour le transport réactif. Ces travaux ont permis d'aboutir à une méthodologie de couplage générale, c'est-à-dire applicable pour des domaines quelconques, avec ou sans recouvrement.



Sous-domaine réactif (rouge), domaine non réactif (bleu) et recouvrement (magenta).

Cette stratégie a été mise en œuvre dans un code prototype dans le cadre du projet ANR SHPCO₂, et devrait être prochainement testée sur des cas réels pour évaluer tout son potentiel. ■

F. Haeberlein, A. Michel, F. Caetano, Time space domain decomposition for reactive transport, Procedia Computer Science, 2010, 1 (1), 753-760.

Contact scientifique :
anthony.michel@ifpen.fr

Simulation and Co.



Plateforme de simulation HIL permettant de tester en temps réel les systèmes de contrôle moteur.

Pour évaluer de nouveaux systèmes intégrés, on se heurte fréquemment à l'absence physique de certains composants ou prototypes. La simulation temps réel offre une solution de choix pour pallier ce manque en faisant interagir des éléments réels avec des éléments absents mais simulés.

Toutefois, les modèles des composantes simulées peuvent présenter des complexités ne permettant pas leur exécution en temps réel. La pratique courante consiste alors à les réduire, mais au prix d'une diminution de leurs capacités prédictives et de leur représentativité. Il en résulte donc un effort de validation supplémentaire.

Pour répondre à cette difficulté, IFPEN a suivi une approche originale : appliquer une démarche de cosimulation, facilitant la parallélisation de la résolution des modèles 0D et permettant une intégration modulaire et multirythme. Pour ce faire, des modèles d'exécution temps réel spécifiques ont été proposés. Ils assurent un compromis entre la qualité des résultats et la performance de l'exécution distribuée sur des PC multicœurs. Devenues ainsi possibles, de nouvelles méthodes d'ordonnancement temps réel ont été décrites, étudiées

théoriquement et validées expérimentalement.

Ces travaux ont permis, entre autres, d'améliorer les méthodes de prototypage rapide des lois de contrôle moteur, ou encore d'étendre les capacités d'un banc d'essai haute dynamique à la validation de concepts de groupes motopropulseurs hybrides.

Les travaux qui se poursuivent aujourd'hui visent à permettre la parallélisation automatique des modèles 0D de systèmes complexes. ■

P. Marti, A. Camacho, M. Velasco, M. Ben Gaid, IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2010, 6 (4), 503-520.

M. Ben Gaid, A. Cela, Y. Hamam, IEEE Transactions on Control Systems Technology, 2009, 17 (2), 309-326.

Contacts scientifiques :
mongi.ben-gaid@ifpen.fr
nicolas.pernet@ifpen.fr

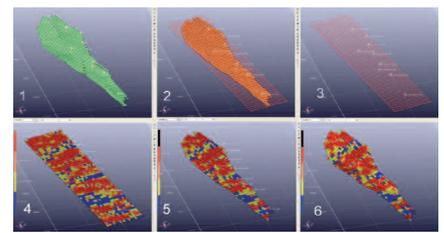
Quand les mailles s'en mêlent

Pour mieux connaître et exploiter les ressources fossiles, les modèles de réservoir sont essentiels. Leur alimentation en propriétés physiques à partir de données de puits est une étape clé de leur construction.

Dans les méthodes actuelles, pour peupler en propriétés un maillage stratigraphique CPG (*Corner Point Geometry*), on effectue d'abord un remplissage dans un maillage cartésien de taille équivalente (dans chaque direction), obtenu en moyennant les longueurs d'arêtes. Les propriétés ainsi calculées sont ensuite reportées telles quelles dans le maillage CPG initial, car il y a correspondance maille à maille. Ceci revient à déformer le maillage cartésien de manière à lui faire épouser la forme du maillage CPG. Cependant, cela a pour effet de fausser les calculs des distances de corrélation entre marqueurs aux puits dans les simulations géostatistiques de remplissage

et, par conséquent, induit surtout des distorsions sur les corps simulés. Pour résoudre ce problème, IFPEN a mis au point des méthodes innovantes permettant de faire un "bon" passage du maillage CPG de l'espace structural au maillage cartésien de l'espace de remplissage géostatistique.

L'idée directrice est de calculer les distances de corrélation entre puits à partir d'un dépliage "quasi isométrique" du maillage CPG de l'unité stratigraphique dans l'espace de remplissage. On utilise ensuite ce même dépliage pour le transfert inverse des propriétés de l'espace de remplissage vers l'espace structural tel qu'illustré ci-contre. Ceci est valide à partir du moment où ces volumes sont d'épaisseurs fines, ce qui est toujours le cas en pratique. Ce travail a abouti à un prototype en cours de validation, qui sera industrialisé en 2013. ■



Les différentes étapes de la méthodologie :

- 1 : maillage CPG initial
- 2 : maillage CPG déplié
- 3 : maillage cartésien de remplissage avec report de puits selon dépliage
- 4 : maillage cartésien peuplé par géostatistique
- 5 : maillage CPG déplié peuplé par upscaling à partir du cartésien
- 6 : maillage CPG initial peuplé à partir du CPG déplié.

M. Poudret, C. Bennis, H. Bourouchaki, J.-F. Rainaud, New flattening-based methodology for more accurate geostatistical reservoir populating, à paraître, *Engineering with Computers Journal*.

Contact scientifique :
chakib.bennis@ifpen.fr

Le turbo bien piloté

Les dispositifs de suralimentation des moteurs constituent un élément clé des nouvelles architectures de la boucle d'air. Ils permettent d'améliorer l'efficacité des moteurs essence par la technique du *downsizing* et de diminuer les émissions de polluants des moteurs diesel en favorisant l'admission de taux élevés de gaz brûlés. Les technologies de suralimentation disponibles se diversifient (turbine à géométrie variable, suralimentation à double étage, compresseur électrique), ce qui conduit à l'évolution de leurs systèmes de contrôle.

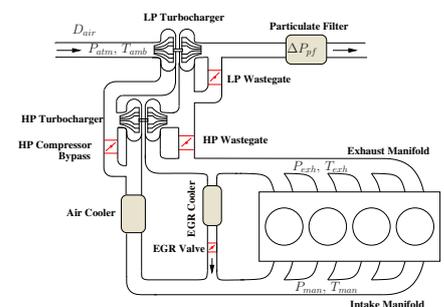
L'objectif du contrôle de la suralimentation est de satisfaire une consigne de pression en minimisant le temps de réponse du système, en prenant en compte des contraintes et des interactions multiples.

L'approche IFPEN repose sur l'utilisation de modèles réduits du système, à partir desquels on développe des lois de

commande simples dont les propriétés (stabilité, convergence, respect des contraintes) peuvent être vérifiées sur ces modèles réduits. Dans un deuxième temps, des tests expérimentaux valident les hypothèses réalisées dans la réduction du modèle. Les lois de commande proposées sont en général basées sur la planification de trajectoire et la linéarisation par retour d'état.

Un des intérêts de l'approche réside dans le modèle réduit proposé. En effet, il fournit une action boucle ouverte qui peut être intégrée facilement dans un contrôle moteur industriel, sans remettre en cause sa structure.

Aujourd'hui, les stratégies de contrôle d'une double suralimentation développées à IFPEN sont intégrées dans un calculateur de véhicule de série, et des stratégies de commande d'un turbo-compresseur à géométrie variable sont prêtes à être industrialisées. ■



Moteur équipé d'une double suralimentation à deux étages.

P. Moulin, J. Chauvin, Modeling and control of the air system of a turbocharged gasoline engine, *Control Engineering Practice*, 2011, 19 (3), 287-297. DOI : 10.1016/j.conengprac.2009.11.006

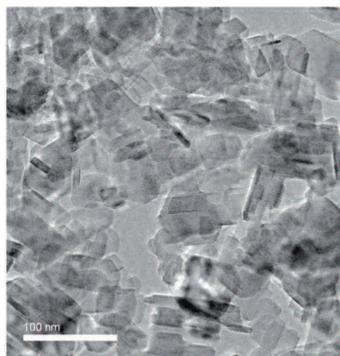
J. Chauvin, O. Grondin, P. Moulin, Control Oriented Model of a Variable Geometry Turbocharger in an Engine with Two EGR Loops, *Oil & Gas Science and Technology - Revue d'IFP Energies nouvelles*, 2011, 66 (4), 563-571. DOI : 10.2516/ogst/2011103

Contact scientifique :
philippe.moulin@ifpen.fr

Au cœur des catalyseurs

Améliorer l'activité des catalyseurs est nécessaire pour rendre les technologies de raffinage plus performantes et plus propres. Cette activité est liée, en partie, à leur microstructure, elle-même très dépendante de la morphologie des nanoparticules qui la composent. Pour accéder à cette propriété clé, on utilise aujourd'hui des techniques de caractérisation standard ne fournissant que des informations sur la taille moyenne de ces nanoparticules. La microstructure est certes visible en microscopie électronique en transmission (MET), mais ces images sont délicates à analyser. En effet, on observe des enchevêtrements de particules semi-transparentes dont les dimensions précises ne peuvent être mesurées directement, car ces nanoparticules sont très difficilement individualisables.

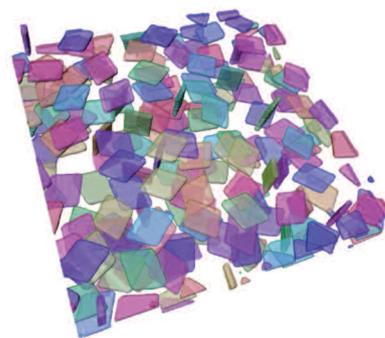
La solution développée par IFPEN, en collaboration avec le Centre de Morphologie Mathématique (CMM) de Mines ParisTech, utilise un modèle numérique stochastique de structure. Il permet de remonter à la distribution en taille des



Observation MET de nanoparticules de boehmite (0.41 nm.pixel⁻¹).

nanoparticules observées, à partir d'indicateurs statistiques estimés sur les données expérimentales. Cette approche a été utilisée pour l'analyse de nanoparticules de boehmite servant à la création de supports de catalyseurs.

Les résultats obtenus, inédits à ce niveau de précision, améliorent la connaissance de la microstructure de ces supports et des relations propriétés (activité)/structure. Ceci permet d'envisager de



Modèle stochastique 3D simulé à partir d'indicateurs statistiques estimés sur les données expérimentales observées.

futures innovations afin d'augmenter les performances des prochaines générations de catalyseurs. ■

M. Moreaud, D. Jeulin, V. Morard, R. Revel, TEM image analysis and modelling: application to boehmite nanoparticles, *Journal of Microscopy*, 2012, 245 (2), 186-199. DOI : 10.1111/j.1365-2818.2011.03560.x

Contacts scientifiques :
maxime.moreaud@ifpen.fr
laurent.duval@ifpen.fr

Mise en place d'un incubateur interne d'innovations de rupture

Afin de renforcer sa capacité d'innovation, IFPEN a mis en place un dispositif interne d'incubation pour des idées s'inscrivant dans des thématiques nouvelles. Cet incubateur doit permettre de créer une dynamique pour générer, accompagner et sélectionner des idées radicalement innovantes. Les premières thématiques retenues concernent le stockage de l'énergie et l'économie circulaire.

Distinctions

• **Anne-Lise Guilmin**, doctorante, et ses co-auteurs William Sassi et Jean-François Barthélémy, ingénieurs, ont reçu le prix du meilleur poster du 46^e U.S. Rock Mechanics/Geomechanics Symposium de l'American Rock Mechanics Association, qui s'est tenu à Chicago en juin dernier. Ce poster présentait des travaux s'appuyant sur une modélisation multi-échelle pour simuler le couplage hydromécanique d'une colonne sédimentaire soumise à des contraintes tectoniques lors de sa sédimentation.

• **Jean-Marc Daniel**, ingénieur, a reçu le 2^e prix de l'Award of Excellence "Top 10" Poster Presentation de la conférence annuelle de l'American Association of Petroleum Geologists, pour sa présentation d'une méthodologie innovante de la mesure des contraintes affectant les bassins sédimentaires au cours de leur évolution géologique (avril 2012).

• **Mahdi Yazdanpanah**, doctorant, a reçu le prix de thèse 2012 du Codegepra (Comité de développement du génie des procédés en Rhône-Alpes) pour sa thèse intitulée "Étude d'une configuration de combustion en boucle chimique (CLC) avec charges gazeuses pour le captage du CO₂" (14 juin 2012).

• **Jérémy Dhainaut**, doctorant, a reçu le prix de la meilleure communication orale lors du 35^e congrès international organisé par la British Zeolite Association (BZA) en juillet dernier. Il y a présenté ses travaux sur la synthèse de nanofeuillets de zéolithe MFI en présence de mono-ammonium à la fois promoteur de germination (structurant) et inhibiteur de croissance.

HDR

• **Jean Brac**, HDR de l'université Pierre et Marie Curie (UPMC) : "Calculs intensifs haute performance en ingénierie pétrolière" (6 juillet 2012).

Prochains événements scientifiques

• Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles – **Colloids and Complex Fluids** – 17-19 octobre 2012, IFPEN Rueil-Malmaison.

• Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles – **IFAC Workshop on Engine and Powertrain Control, Simulation and Modeling, E-COSM'12** – 23-25 octobre 2012, IFPEN Rueil-Malmaison.

• Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles – **LES for Internal Combustion Engine Flows** – 29-30 novembre 2012, IFPEN Rueil-Malmaison.

Directeur de la publication : Marco De Michelis
Rédacteur en chef : Sophie Jullian
Comité éditorial : Xavier Montagne, Emmanuelle Hutin
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 59 00 - Fax : +33 1 47 52 70 96 - 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 – Contact institutionnel : K. Ragli - Tél. : 01 47 52 58 75