



Science@ifpen

N° 12 - Mars 2013

La combustion s'emballa



Le domaine du transport est en pleine mutation : course au rendement, diversification vers des carburants alternatifs

et demande pour des systèmes partiellement ou complètement électrifiés constituent des moteurs actuels d'innovation.

Grâce à l'expertise de ses équipes et à leur capacité à appréhender de nouvelles problématiques, en association avec des partenaires académiques de renommée mondiale et des industriels de premier plan, IFPEN est un acteur reconnu internationalement dans le domaine du transport.

L'approche système globale suivie par IFPEN s'appuie sur le développement et l'utilisation d'outils de simulation, dont les méthodes de simulation aux grandes échelles (LES). Une étude bibliométrique récente fait ainsi apparaître IFPEN comme le leader mondial de la LES dans son application aux moteurs. Ces outils sont associés à des méthodes expérimentales pointues, tout en gardant à l'esprit la finalité industrielle. Quelques exemples significatifs de travaux menés par IFPEN sont présentés dans ce numéro.

Bonne lecture,

Stéphane Henriot, Directeur de la direction Techniques d'applications énergétiques

Les moteurs à allumage commandé fonctionnant à des charges élevées sont victimes de combustions anormales qui limitent leur rendement et mettent en danger leur intégrité mécanique.

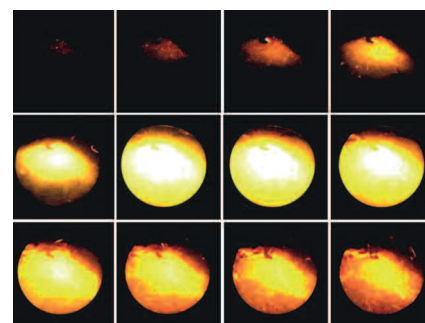
Parmi les combustions anormales, le pré-allumage, phénomène qui se manifeste par une auto-inflammation incontrôlée du mélange avant l'allumage par bougie, est une problématique très récente. Ses causes sont délicates à cerner tant sont nombreux les couplages qui peuvent mener localement à l'atteinte de conditions thermodynamiques favorables à l'auto-inflammation.

Grâce à une démarche à la fois expérimentale et numérique, IFPEN a développé une approche intégrative permettant d'identifier les mécanismes principaux d'auto-inflammation dans ces conditions d'études difficiles. De nouvelles méthodologies d'essais et d'analyses dédiées ont ainsi été développées⁽¹⁾ : elles ont apporté plusieurs éléments de compréhension sur les phénomènes physiques à l'origine de l'auto-inflammation (conditions thermiques locales, évaporation différentielle des composés du carburant, etc.).

L'expertise acquise dans le diagnostic (cf. figure) et l'analyse de la combustion

permettent une meilleure compréhension des phénomènes en jeu, ce qui est un préalable indispensable au développement de nouveaux systèmes de combustion performants.

Les travaux se poursuivent par l'étude du rôle des interactions entre les carburants et les lubrifiants. Ils visent également à mieux caractériser les modes d'auto-inflammation⁽²⁾. ■



Visualisations endoscopiques du pré-allumage réalisées en moteur à piston.

(1) J.M. Zaccardi, L. Duval, A. Pagot, SAE Int. J. Engines, 2009, 2(1), 1587-1600. DOI : 10.4271/2009-01-1795

(2) J. Rudloff, J.M. Zaccardi, S. Richard, J. Anderlohr, Proc. Combust. Inst., 2013, 34(2), 2959-2967. DOI : 10.1016/j.proci.2012.05.005

Contact scientifique :
j-marc.zaccardi@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.



Bien diluer pour moins consommer

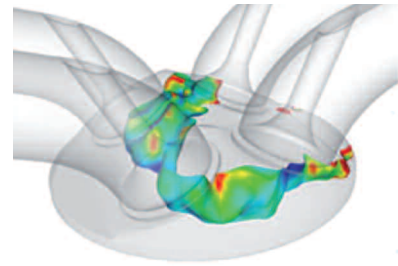
La combustion en milieu réactif dilué par des gaz brûlés, à forte charge, est aujourd'hui considérée comme un point de passage clé pour la mise au point des futurs moteurs. Dans le cas des moteurs à allumage commandé, la dilution peut notamment contribuer à l'amélioration du rendement. Néanmoins, une dilution importante peut mener à une augmentation des variabilités cycliques qu'il est nécessaire de maîtriser.

Afin d'optimiser l'utilisation de la dilution, il est nécessaire de lever un certain nombre de verrous scientifiques quant à l'impact des gaz diluants, par exemple sur la cinétique chimique de la combustion, sur les caractéristiques de la combustion turbulente, sur l'allumage et sur la propagation de flammes en milieu dilué.

La compréhension et la maîtrise des mécanismes physiques sont devenues un axe majeur pour IFPEN dans l'accompagnement scientifique du développement des futures motorisations. Elles s'appuient

notamment sur des outils de simulation validés. IFPEN a ainsi largement contribué au développement d'outils CFD 3D de simulation aux grandes échelles (LES, Large Eddy Simulation), domaine où il a acquis un leadership mondial. Ces outils sont bien adaptés à la simulation des écoulements réactifs dans les moteurs à combustion interne. Ainsi, la LES s'est montrée essentielle pour l'étude des combustions anormales et des variabilités cycliques dues notamment à l'utilisation de gaz diluants.

Les études menées ont d'une part contribué à identifier les principaux phénomènes responsables pour ces variations⁽¹⁾, et d'autre part permis d'intégrer les résultats de simulations 3D complexes à des outils de simulation système 0D. Ces derniers constituent aujourd'hui un vecteur important de valorisation de la LES appliquée aux moteurs thermiques. ■



Simulation LES d'une flamme de pré-mélange dans un moteur à allumage commandé à charge homogène (Lecocq et al.⁽²⁾).

[1] B. Énaux, V. Granet, O. Vermorel, C. Lacour, C. Pera, C. Angelberger, T. Poinso, LES study of cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine, *Proc. Combust. Inst.*, 2011, 33(2), 3115-3122. DOI : 10.1016/j.proci.2010.07.038

[2] G. Lecocq, S. Richard, J.-B. Michel, L. Vervisch, A new LES model coupling flame surface density and tabulated kinetics approaches to investigate knock and pre-ignition in piston engines, *Proc. Combust. Inst.*, 2011, 33(2), 3105-3114. DOI : 10.1016/j.proci.2010.07.022

Contacts scientifiques :
christian.angelberger@ifpen.fr
antonio.pires-da-cruz@ifpen.fr

Véhicules électriques : moteur, ça chauffe !

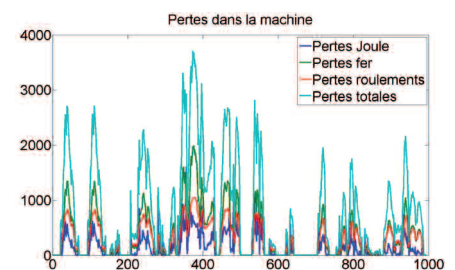
La traction automobile se caractérise par des besoins en puissance importants, mais limités dans le temps. Le dimensionnement d'une machine électrique pour un tel usage est donc très différent du dimensionnement des machines industrielles. Pour chaque application véhicule, il est nécessaire d'optimiser le compromis puissance spécifique/rendement, sans oublier la contrainte du coût, constante du domaine automobile.

Le dimensionnement optimisé d'une machine électrique passe donc par l'utilisation de modèles multiphysiques (modélisation électromagnétique, incluant la saturation magnétique des matériaux, couplée à une modélisation thermique) suffisamment rapides pour pouvoir être utilisés en simulation système et couplés à un outil d'optimisation. L'approche retenue par IFPEN repose sur un modèle électromagnétique utilisant des réseaux de reluctances pour

décrire la circulation du flux magnétique. Pour chaque technologie de machine, le schéma du réseau de reluctances est identifié à partir des lignes de champ et des niveaux d'induction calculés par éléments finis. La saturation magnétique est de plus prise en compte par des reluctances non linéaires. Dans les phases d'optimisation, ce réseau est recalculé via un modèle simplifié d'extrapolation développé par IFPEN. Ce modèle magnétique est ensuite couplé à une première génération de modèle thermique de type circuit électrique équivalent et intégrant tous les transferts thermiques au sein de la machine.

La modélisation globale ainsi mise en œuvre pour les machines électriques de traction permet leur dimensionnement optimal pour chaque application. Elle fournit aussi le niveau de modélisation adapté à la simulation et à l'optimisation globale du véhicule.

Les futurs travaux vont se focaliser sur l'amélioration du modèle thermique de la machine électrique. ■



Calcul des pertes d'une machine réelle sur un usage véhicule (cycle Artemis Urbain).

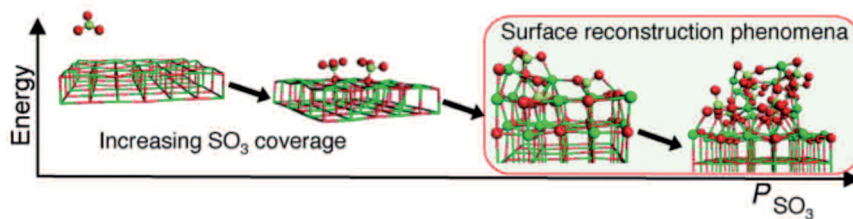
S. Küttler, K. El-Kadri Benkara, G. Friedrich, F. Vangraefschèpe, A. Abdelli, Analytical model taking into account the cross saturation for the optimal sizing of IPMSM, *Conf. ICEM 2012 Marseille*, 2-5 September 2012.

Contact scientifique :
franck.vangraefschèpe@ifpen.fr

Pots catalytiques : un modèle d'empoisonnement

Les systèmes de dépollution automobile (pots catalytiques) sont soumis à des contraintes de durabilité croissantes. Il s'agit de garantir leur activité, vérifiée par un outil de diagnostic embarqué (OBD) ou lors des contrôles de conformité en service (ISC). L'empoisonnement du catalyseur par le soufre, issu soit des carburants, soit du lubrifiant, est particulièrement problématique pour le fonctionnement de certains systèmes de post-traitement, parmi lesquels le piège à NO_x . La compréhension et la maîtrise des processus conduisant à cet empoisonnement s'avèrent donc essentielles pour l'industrie automobile.

Dans le cadre d'une collaboration avec Renault et le CNRS^[1], IFPEN a étudié expérimentalement la sulfatation et la régénération d'un piège à NO_x commercial, en combinant spectrométrie infrarouge, diffraction des rayons X et microscopie électronique. Deux types d'espèces soufrées ont été identifiées : covalentes (surface) et ioniques (*bulk*). En outre, l'étude a montré que le mode de vieillissement impactait fortement l'état



Impact de la reconstruction induite par SO_3 sur les propriétés thermodynamiques du matériau de piégeage, résultats obtenus par calculs *ab initio*^[2].

structural du matériau de stockage, et donc son mécanisme d'empoisonnement : un vieillissement en four diffère de celui rencontré sur véhicule.

Ces différences ont été interprétées et expliquées dans le cadre d'une approche multi-échelles basée sur de la modélisation moléculaire. Cette approche permet en effet d'étudier finement les processus de formation et de rupture de liaisons à l'échelle atomique et de générer des données thermocinétiques qui deviennent exploitables par un modèle industriel^[2]. Un modèle d'empoisonnement s'appuyant sur des calculs quantiques a ainsi été développé, et a permis d'expliquer aussi bien le déplacement des sulfates formés depuis

le cœur vers la surface du matériau de stockage, que la restructuration de ce dernier observée expérimentalement. Ce modèle est désormais intégré dans les outils de simulation système développés par IFPEN pour la conception et le contrôle des organes de post-traitement. ■

[1] S. Benramdhane, C.-N. Millet, E. Jeudy, J. Lavy, V. Blasin Aubé, M. Daturi, *Catalysis Today*, 2011, 176(1), 56-62. DOI : 10.1016/j.cattod.2011.03.049

[2] N. Rankovic, C. Chizallet, A. Nicolle, P. Da Costa, *Chemistry - A European Journal*, 2012, 18(34), 10511-10514. DOI : 10.1002/chem.201103950

Contacts scientifiques :
andre.nicolle@ifpen.fr
celine.chizallet@ifpen.fr

Vers des carburants inoxydables

L'évolution parallèle de la technicité des systèmes d'injection et des formulations de carburants est imposée par les contraintes environnementales de plus en plus sévères.

Le recours croissant aux carburants alternatifs (biodiesel) et aux procédés de traitement poussés de conversion pour la production de gazoles et *jet fuels* a eu pour effet de réduire la stabilité à l'oxydation des produits. Dans le même temps, l'augmentation de la pression d'injection et l'utilisation de la multi-injection ont augmenté la sensibilité aux phénomènes d'encrassement, notamment pour les véhicules diesel. À cela s'ajoute la généralisation de l'hybridation, qui peut entraîner un accroissement du temps de stockage du carburant dans le réservoir.

Afin d'assurer la tenue dans le temps et éviter des défaillances, il convient donc

de comprendre précisément les phénomènes en jeu lors de la formation de ces dépôts aux conséquences potentiellement critiques, notamment pour les turbines aéronautiques.

Pour y parvenir, la démarche suivie s'appuie à la fois :

- sur la parfaite connaissance des carburants, tant par la maîtrise de leur formulation que de leur caractérisation fine ;
- sur une approche originale de la caractérisation des vernis et dépôts formés.

Des travaux sont menés à différentes échelles afin de reproduire ces dépôts, en partant du système le plus simple (oxydation du carburant en enceinte régulée) jusqu'au plus complexe (moteur), en passant par le système d'injection. Ce travail séquentiel permet de mettre en avant les paramètres déterminants de chaque étape (chimie,



Évolution du carburant lors de phases d'oxydation.

conditions thermodynamiques, effets catalytiques, etc.) et ainsi d'aboutir à une identification fine des processus mis en jeu. Ces travaux devraient déboucher à terme sur une modélisation des phénomènes et aider à la définition des solutions pour y remédier. ■

L. Starck, M. Sicard, F. Ser, N. Jeuland, Potential of alternative fuels for aircraft: focus on thermal and oxidation stability, *IASH 2009, Prague, Czech Republic*, 18-22 October 2009.

Contacts scientifiques :
arij.benamara@ifpen.fr
nicolas.jeuland@ifpen.fr

Réseau ECN : l'union fait la force

L'évolution des systèmes de combustion diesel répond à des contraintes à la fois environnementales et économiques. Deux axes de recherche se dégagent : d'une part, l'amélioration de la combustion dite "conventionnelle", et d'autre part, le développement de nouveaux modes de combustion offrant de meilleurs compromis NO_x /particules. Quelle que soit la voie envisagée, cela nécessite une compréhension détaillée de tous les processus physico-chimiques impliqués dans la combustion, depuis la formation du mélange jusqu'à l'oxydation des suies.

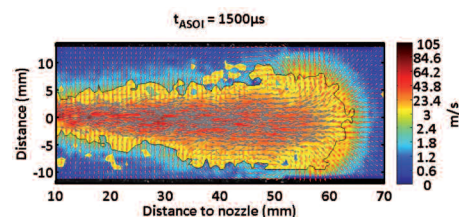
Le nombre de paramètres en jeu, leurs plages de variation extrêmement larges et les couplages forts existants entre eux ainsi qu'avec l'environnement moteur, font qu'il est très difficile pour une seule institution de recherche d'appréhender le problème dans sa globalité.

C'est la raison pour laquelle Sandia National Labs (États-Unis) a créé en 2008 le réseau ECN (*Engine Combustion Network*) pour fédérer les efforts de recherche mondiaux sur le spray diesel, qu'ils soient expérimentaux ou dans le

domaine de la modélisation. IFPEN a été le premier centre de recherche à s'associer à ce réseau, dès 2009, notamment en réalisant la première étude du réseau conjointement avec Sandia, et en co-organisant les deux premiers workshops ECN.

Au travers de ce réseau, la mise en commun des résultats expérimentaux des différentes institutions permet non seulement de profiter de la complémentarité des expertises, mais aussi, pour IFPEN, d'améliorer la maîtrise de ses moyens d'essais, de définir de nouveaux standards pour les méthodes de mesures et de renforcer les interactions entre expériences et simulation. En 2012, IFPEN a ainsi mesuré les champs de vitesses autour et à l'intérieur du spray.

La collaboration au sein du réseau ECN, bien qu'encore à ses débuts, est en forte croissance, comme le confirme le doublement du nombre de participants au deuxième workshop en septembre 2012. Ce réseau s'ouvre donc à de nouvelles institutions et abordera de nouveaux



Exemple de champs de vitesses autour (flèches rouges) et dans (flèches grises) le spray diesel. L'échelle de couleurs représente la norme des vecteurs.

sujets, comme de nouvelles conditions aux limites, des diagnostics plus complexes et une comparaison de plus en plus poussée entre les modèles 3D et les expériences. ■

M. Bardi, R. Payri, L.-M. Malbec, G. Bruneaux, L.M. Pickett, J. Manin, T. Bazyn, C. Genzale, Engine Combustion Network (ECN): Comparison of Spray Development, Vaporization and Combustion in Different Combustion Vessels, *Atomization and Sprays*, à paraître.

M. Meijer, B. Somers, J. Johnson, J. Naber, S.-Y. Lee, L.-M. Malbec, G. Bruneaux, L.M. Pickett, M. Bardi, R. Payri, T. Bazyn, Engine Combustion Network (ECN): Characterization and Comparison of Boundary Conditions for Different Combustion Vessels, *Atomization and Sprays*, à paraître.

Contacts scientifiques :
louis-marie.malbec@ifpen.fr
gilles.bruneaux@ifpen.fr

HDR

- **Antônio Pires da Cruz**, HDR de l'INP de Toulouse : "Modeling chemical kinetics and turbulence interactions for internal combustion engine reactive flow simulations" (15 novembre 2012).
- **Carlos Nieto**, HDR de l'université de Paris-Sud : "Application de la simulation moléculaire aux calculs des propriétés thermo-physiques dans le domaine des carburants et du captage/stockage du CO_2 " (27 novembre 2012).
- **Véronique Lachet**, HDR de l'université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II : "La simulation moléculaire : un outil au service de l'industrie. Application aux opérations de captage et de stockage du dioxyde de carbone" (19 décembre 2012).
- **Marc Fleury**, HDR de l'université Paris Diderot-Paris 7 : "Caractérisation de milieux poreux par les propriétés électriques et la résonance magnétique" (9 janvier 2013)

Distinctions

- **Kirsten Leistner**, doctorante, a reçu le prix Gérard De Soete 2012 pour sa thèse intitulée "Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation catalysée de suies diesel" (29 novembre 2012).
- **François Roure**, Directeur expert, a reçu le prix André Dumont de la Geologica Belgica à l'issue de l'assemblée générale de l'association (7 mars 2013).

Visiteurs scientifiques

- **Paulo de Souza Mendes**, Professeur à la Pontifícia Universidade de Católica (Rio de Janeiro, Brésil), a été accueilli à IFPEN du 3 septembre 2012 au 28 février 2013, au sein de la direction Mécanique appliquée.
- **Camilla Gambini Pereira**, Professeur au département "Chemical Engineering" de l'université fédérale Rio Grande do Norte (Brésil), est accueillie depuis le 4 mars dernier au sein de la direction Chimie et Physico-chimie appliquées.

- **Faiçal Larachi**, Professeur à la faculté des Sciences et de Génie chimique de l'université de Laval (Canada), est accueilli depuis le 1^{er} mars dernier au sein de la direction Conception Modélisation Procédés.

Prochains évènements scientifiques

- **PetroPhase 2013 - Petroleum Phase Behavior and Fouling** - 10-13 juin 2013, IFPEN Rueil-Malmaison
- **Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles - Viscoplastic Fluids: From Theory to Application** - 18-21 novembre 2013, IFPEN Rueil-Malmaison

Directeur de la publication : Marco De Michelis
Rédacteur en chef : Sophie Jullian
Comité éditorial : Xavier Montagne, Xavier Longaygue, Laurent Forti
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