

# Science@ifpen

N° 32 - Mars 2018



## Mise en observation des suies dans une flamme Diesel



*Le secteur des transports ne cesse de se transformer et des mutations profondes sont encore à venir. Enjeu majeur de la mobilité de demain,*

*l'électrification s'accompagnera de bouleversements technologiques et logiciels, avec un développement accru des véhicules connectés et autonomes, intégrant notamment des principes d'écoconduite responsable.*

*Pour autant, les motorisations thermiques restent les plus répandues pour encore quelques années. Les enjeux de l'amélioration de leur rendement et de la réduction de leurs émissions sont cruciaux pour engager immédiatement la transition vers une mobilité décarbonée.*

*À côté des développements de nouveaux logiciels et services pour l'électrification des véhicules et la mobilité connectée, les chercheurs de la direction Systèmes Moteurs et Véhicules mettent leur expertise au service de la résolution de ces défis. Leurs challenges d'aujourd'hui : préparer les évolutions plus lointaines sans négliger le court terme, essentiel pour répondre aux besoins de l'industrie et de la société, et en partenariat avec des laboratoires de référence à l'international.*

Bonne lecture,

Stéphane Henriot,  
Directeur Systèmes Moteurs et Véhicules

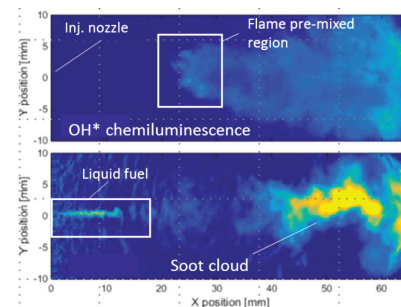
La réduction des émissions polluantes des moteurs thermiques requiert une connaissance détaillée des processus physico-chimiques de la combustion. Si les carburants ont été longtemps considérés comme une constante pour chaque type de moteur, l'introduction progressive des biocarburants et la recherche de modes de combustion innovants ont rendu nécessaire une meilleure prise en compte de l'impact d'une variabilité des carburants sur la formation des polluants.

La tâche est ardue car les carburants sont formés de milliers de composants carbonés / hydrocarbonés et la reproduction fidèle de leur comportement échappe à la modélisation chimique. En outre, les essais de caractérisation standards (par exemple de l'indice de cétane) ne sont pas suffisamment descriptifs.

Pour comprendre la relation entre les propriétés du carburant et la formation de suies dans une combustion de type Diesel, une méthodologie de caractérisation innovante a été mise en place par les chercheurs d'IFPEN. Elle se déroule dans une enceinte à haute pression et haute température, et emploie des techniques de mesures optiques avancées, afin de visualiser de manière simultanée (figure) :

- les zones de réaction, par chimiluminescence<sup>a</sup> ;
- la répartition quantitative des suies dans la flamme, par mesure d'extinction<sup>b</sup> 2D.

L'utilisation de ces techniques a révélé que la composition des carburants agissait de



Images simultanées de la zone de réaction (haut) et de la répartition des suies (bas).

façon indépendante sur plusieurs aspects de la combustion, dont les deux principaux facteurs affectant la formation des suies dans la flamme : la richesse dans la zone de prémélange et la chimie locale.

L'impact de différentes familles d'hydrocarbures<sup>c</sup> a été caractérisé dans des conditions représentatives du fonctionnement du moteur<sup>(1)</sup> et ce nouveau dispositif pourra aussi servir soit à évaluer de nouveaux carburants, soit à valider les carburants modèles utilisés dans les outils de simulation numérique. ■

a - Mesure de la lumière émise par une réaction chimique.  
b - Mesure d'absorption de lumière.  
c - Comme les alcanes aliphatiques à longue chaîne (n-dodécane) ou les aromatiques (n-propylbenzène).

(1) M. Bardi, G. Bruneaux, O. Colin, SAE Technical Paper 2017-01-0721, 2017  
DOI : 10.4271/2017-01-0721

Contact scientifique :  
michele.bardi@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.

# La LES passe au transitoire pour des motorisations plus propres

Les moteurs essence à injection directe émettent des particules de suie lors des phases de transitoires rapides. Ce phénomène, encore très mal compris, est pris en compte lors des tests sur les nouveaux cycles d'homologation WLTC<sup>a</sup> visant à reproduire plus fidèlement l'usage réel des véhicules.

Les simulations numériques à haute résolution de l'écoulement dans la chambre de combustion, capables notamment de résoudre les variations cycle à cycle, permettent d'améliorer la compréhension des mécanismes à l'origine de cette production de suies. Toutefois si ces calculs, basés sur la simulation aux grandes échelles (LES<sup>b</sup>), sont aujourd'hui bien maîtrisés pour des points de fonctionnement stabilisés<sup>(1)</sup>, ils n'avaient encore jamais été réalisés pour des transitoires.

Les travaux engagés par IFPEN<sup>(2-3)</sup>, dans le projet ANR Astride<sup>c</sup>, ont démontré la pertinence de la LES pour traiter cette problématique, au travers de premiers calculs mettant en œuvre notamment un couplage de codes 1D-3D. Ces simulations

ont notamment permis de reproduire l'impact des phases transitoires moteurs, i. e. des variations du régime de rotation du moteur (par exemple, une accélération entre 1 000 tr/min et 1 800 tr/min sur la figure), sur l'acoustique dans la ligne d'admission, et donc sur le remplissage et l'aérodynamique dans la chambre de combustion.

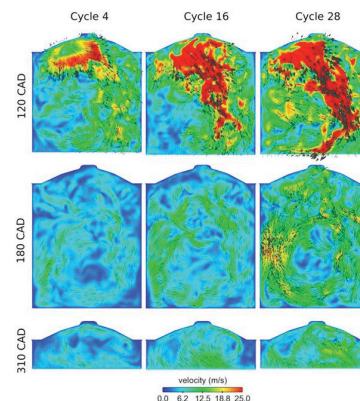
Il reste aujourd'hui à affiner les résultats en séparant les composantes moyennes et fluctuantes des champs de vitesses. Pour cela, deux axes d'étude sont suivis : l'obtention d'une moyenne exploitable par la réalisation de plusieurs transitoires, et la mise en place de post-traitements spécifiques, tels que l'EMD<sup>d</sup> <sup>(4)</sup>.

(1) A. Robert, S. Richard, O. Colin, L. Martinez, L. de Francqueville et al, Proc. Combust. Inst. 35(3), 2015.

(2) B. Roux, IFPEN, Ph.D. thesis 2015.

(3) A. Poubeau, S. Jay, A. Robert, E. Nicoud et al., SAE Technical Paper 2017 DOI : 10.4271/2017-24-0028

(4) M. Sadeghi, K. Abed-Meraim, F. Foucher, C. Mounaïm-Rousselle, iTi Conference on Turbulence, Bertinoro, Italie, sept. 2014.



Champs de vitesses instantanées résolues en LES à trois angles vilebrequin, et pour trois cycles du transitoire : cycle 4 (1 000 tr/min), cycle 16 (1 400 tr/min) et cycle 28 (1 800 tr/min).

- a - Worldwide harmonized Light vehicles Test Cycles.
- b - Large-Eddy Simulation.
- c - Aerodynamics and Sprays during Transients of Gasoline Direct Injection Engines.
- d - Empirical Mode Decomposition.

Contact scientifique :  
adele.poubeau@ifpen.fr

## Pour les carburants aéronautiques... tout est histoire de compromis

En aéronautique, les carburants issus d'huiles végétales hydrotraitées (HEFA<sup>a</sup>) sont vus comme une alternative au jet A-1<sup>b</sup> pour réduire l'empreinte environnementale du transport aérien. Toutefois, cette stratégie oriente vers des carburants majoritairement constitués de composés paraffiniques, ce qui génère des problèmes d'étanchéité des circuits. En effet, cette dernière requiert une teneur minimale en aromatiques, dont l'absorption permet d'assurer le gonflement des joints polymères. À l'inverse, ces composés doivent rester en quantité limitée, car ils sont à l'origine de dépôts et de la formation de polluants.

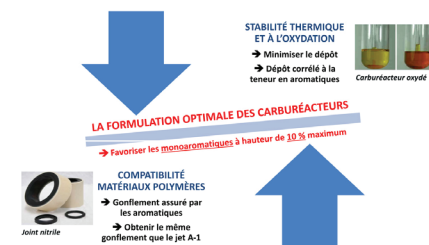
L'optimisation de la formulation de ces carburants aéronautiques synthétiques a été traitée dans le projet CAER<sup>c</sup> grâce à un programme expérimental dédié : tests de compatibilité matériaux, de stabilité thermique et de tenue à l'oxydation<sup>(1)</sup>.

Les équipes d'IFPEN ont ainsi identifié les différents mécanismes en jeu pour la stabilité thermique et à l'oxydation, grâce à des techniques de pointe, couplées à une

approche alliant mesures sur carburants réels et sur fluides modèles. Ces derniers ont été produits à partir d'une base paraffinique de type HEFA, dans laquelle ont été ajoutés du xylène ou de la tétraline à différentes concentrations. La nécessité de la présence des aromatiques pour le gonflement des joints a été confirmée, avec un effet équivalent à celui produit par le jet A-1 pour un ajout de 10 % v/v de l'un ou l'autre des composés testés. Des compositions optimales ont également été identifiées pour les autres critères étudiés.

Au final, il apparaît qu'une formulation favorisant les aromatiques monocycliques comme le xylène à 10 % v/v constitue le meilleur compromis sur l'ensemble des propriétés étudiées<sup>(2)</sup>.

Ce travail se poursuit pour élargir la base de données en termes de composés chimiques, et dans la perspective d'une démarche de modélisation prédictive des relations propriétés vs composition. ■



Optimisation de la formulation d'un carburéacteur.

- a - Hydroprocessed Esters and Fatty Acids.
- b - Carburant utilisé dans l'aviation.
- c - Carburants alternatifs pour l'aéronautique, coordonné par IFPEN.

(1) A. Ben Amara, M.-H. Klopffer, B. Veyrat, L. Starck, International Congress and Expo on Biofuels & Bioenergy, August 29-31, 2016 Sao Paulo, Brésil.

(2) A. Ben Amara, M.-H. Klopffer, M. Alves Fortunato, L. Starck, Optimal jet fuel composition with stability and improved oxidation. Patent WO 2017/050687 A1.

Contacts scientifiques :  
arij.ben-amara@ifpen.fr  
marie-helene.klopffer@ifpen.fr  
laurie.starck@ifpen.fr

# Vie et mort des suies : un modèle pour contrôler le phénomène

Les normes d'homologation des véhicules exigent des moteurs de plus en plus performants (basse consommation et faibles émissions) sur une large plage de fonctionnement. C'est pourquoi de nouvelles architectures moteurs intègrent des technologies telles que l'injection directe ou la recirculation des gaz brûlés, deux leviers d'optimisation de la combustion. Dans ce contexte, les stratégies de contrôle moteur deviennent très sophistiquées, d'où le recours croissant à la simulation système.

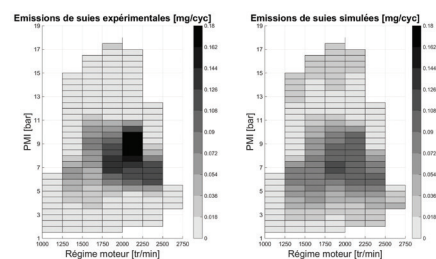
Cependant, la complexité des mécanismes de formation des polluants dans la chambre de combustion, et notamment des suies, rend difficile leur prise en compte détaillée par des approches de simulation système classiques. Pour contourner cette difficulté, IFPEN a développé des modèles phénoménologiques, c'est-à-dire fondés sur la physique des phénomènes mais utilisant des descripteurs plus globaux.

Il existe des corrélations importantes entre les émissions de suies et les conditions thermo-chimiques du mélange

air-carburant à des endroits bien identifiés de la structure du jet Diesel<sup>[1]</sup> : en particulier à la longueur de *lift-off* (point de formation de suies) et au sein de la flamme diffuse (lieu d'oxydation des suies). Ces facteurs sont eux-mêmes directement reliés aux paramètres de contrôle moteur.

Cette connaissance a permis d'élaborer un modèle capable de décrire ces conditions tout au long du cycle moteur<sup>[2]</sup> et d'en tirer une prédiction quantitative de formation des suies (figure). Le modèle obtenu, qui permet aussi de prédire l'impact de variations des réglages par rapport à un point de fonctionnement donné (stratégie d'injection, taux de dilution, niveau de suralimentation), a été intégré dans la librairie IFP-Engine du logiciel Simcenter Amesim<sup>TM</sup> a commercialisé par Siemens.

L'enjeu est désormais de couvrir de plus larges conditions de fonctionnement des moteurs, et pour cela d'y établir la validité des corrélations utilisées. ■



Comparaison des quantités de suies mesurées et calculées dans le domaine de fonctionnement du moteur<sup>b</sup>.

a - Outil de simulation multiphysique.  
b - PMI : pression moyenne indiquée.

[1] L. Pickett, D. Siebers, *Combustion and Flame*, 138, p. 114-135, 2004

[2] A. Dulbecco, G. Font, *SAE Technical Paper* 2017-24-0022.  
DOI : 10.4271/2017-24-0022, 2017

Contact scientifique :  
alesio.dulbecco@ifpen.fr

## Simuler l'allumage

Afin de réduire la consommation des moteurs essence, les constructeurs misent sur la suralimentation et la réduction de la cylindrée. Ce choix conduit cependant à une augmentation du phénomène de cliquetis (auto-inflammation destructive du moteur). Celui-ci peut être évité en augmentant fortement le taux de dilution par des gaz brûlés recirculés, mais au détriment de la stabilité de la flamme lors de l'allumage par la bougie, et donc au détriment de la stabilité du moteur.

Dans ce contexte, les constructeurs ont recours à la CFD<sup>a</sup> et, en particulier, la LES<sup>b</sup> pour comprendre les causes de l'instabilité de la flamme et ainsi y remédier. Toutefois, les modèles de combustion actuels, capables de décrire l'allumage par bougie, ne rendent pas suffisamment compte de ces conditions d'instabilité.

Pour développer un tel modèle<sup>[1]</sup>, IFPEN a collaboré au projet ANR Famac<sup>c</sup>, en fournissant tout d'abord un modèle de circuit électrique, pour une bobine automobile standard, capable de reproduire avec précision l'énergie transférée par la bougie.

Le dépôt d'énergie se faisant le long de l'arc électrique, ce premier modèle a ensuite été complété par un modèle d'arc lagrangien, qui reproduit la forme et l'évolution de l'arc réel (figure 1).

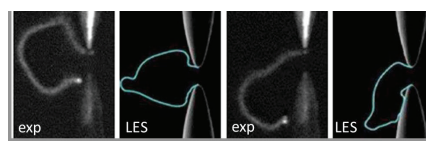


Fig. 1 - Comparaison expérience vs LES pour deux visualisations de l'arc électrique.

Cette approche a permis de simuler correctement l'énergie critique d'allumage au repos, sans turbulence (figure 2). Les premiers calculs sur des « conditions types moteur » (avec turbulence) ont également révélé un très bon accord avec l'expérience.

Ces premiers modèles de représentation des allumages complexes en conditions turbulentes seront évalués sur des cas concrets et serviront à proposer des stratégies d'allumage permettant de réduire le cliquetis. À terme, ils permettront également de concevoir de nouveaux

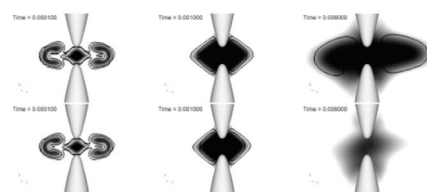


Fig. 2 - Allumages propane/air au repos. Énergie de 107 mJ (haut) et 78 mJ (bas) conduisant respectivement à un succès et un échec de l'allumage.

systèmes d'allumage plus robustes au service de moteurs plus économes et plus propres. ■

a - Computational Fluid Dynamics.  
b - Large-Eddy Simulation.  
c - Fondamentaux d'allumage pour le moteur à allumage commandé.

[1] O. Colin et al., *DNS and LES of spark ignition with an automotive coil*, soumis au Symposium on Combustion 2018

Contact scientifique :  
olivier.colin@ifpen.fr

# Émissions polluantes : mieux les connaître pour mieux les combattre

L'homologation des véhicules atteste que leurs émissions respectent les niveaux imposés par les normes. Si la réglementation actuelle ne concerne qu'un nombre restreint d'espèces chimiques, leur impact sur la santé et l'environnement conduit le législateur à sévérer les normes en réduisant les seuils d'émission et en intégrant de nouveaux polluants. Ceci impose l'acquisition de connaissances plus poussées sur les différents types d'espèces chimiques émises et sur leurs concentrations selon les modes d'utilisation des véhicules.

Pour répondre à ce besoin, IFPEN a coordonné deux projets qui ont fourni un constat détaillé des émissions, réglementées ou non, de véhicules représentatifs du marché automobile français.

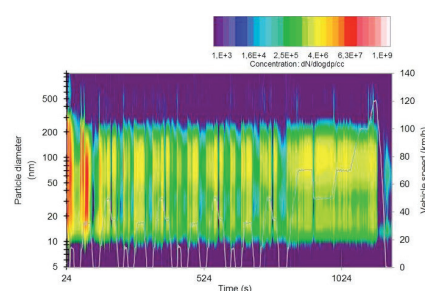
Le projet Ademe Cappnor a mis en évidence :

- les fortes émissions de particules ultrafines d'une motorisation essence à injection directe (figure),
- le très haut niveau d'efficacité des filtres à particules Diesel, grâce auxquels les concentrations émises à l'échappement se situent au niveau du fond atmosphérique urbain<sup>(1)</sup>.

Le projet Cappnor 2 a montré que l'efficacité des deux technologies majeures de réduction des émissions d'oxydes d'azote (NOx)<sup>a</sup> des moteurs Diesel<sup>(2)</sup> dépendait fortement de la façon dont elles sont mises en œuvre par les constructeurs dans les différentes plages de fonctionnement.

Les procédures d'homologation des véhicules ont évolué en 2017 afin d'assurer de faibles niveaux d'émissions sur une plage de sollicitation plus large du moteur thermique. Les résultats de ces deux projets fournissent au législateur le moyen de définir de meilleurs dispositifs de réduction des émissions. Ils indiquent aussi les axes de développement à privilégier par IFPEN pour la conception de nouveaux systèmes de dépollution.

En parallèle, le processus d'amélioration continue se poursuit avec le projet Rhapsodie, qui portera sur les diverses formes d'hydrocarbures aromatiques polycycliques présents à la fois sur les particules et en phase gazeuse. ■



Concentrations de particules (couleur) émises par un véhicule à injection directe d'essence : évolution temporelle selon leur diamètre lorsque la vitesse varie (courbe grise)<sup>b</sup>.

- a - Réduction catalytique par l'urée (SCR : Selective Catalytic Reduction) et piège à NOx (LNT : Lean NOx Trap).  
b - Lorsque varie la vitesse (courbe grise) et la température en entrée du pot catalytique (courbe rouge).

[1] S. Zinola, S. Raux, M. Leblanc, SAE Technical Paper 2016-01-2283, 2016.  
DOI : 10.4271/2016-01-2283

[2] M. Leblanc, L. Noël, B. R'Mili, A. Boréave, B. D'Anna, S. Raux, Journal of Earth Sciences and Geotechnical Engineering, vol.6, no. 4, 2016, 29-50

Contact scientifique :  
stephane.raux@ifpen.fr

## Actualités

• En 2017, IFPEN a déposé 187 brevets dont 79 en relation avec les NTE et a dépassé son précédent record datant de 2016.

• Le colloque IFPEN Panorama 2018 sur la « Transition énergétique : rôle des territoires et défis technologiques » s'est tenu le 8 février. Les publications et la retransmission du colloque sont disponibles sur le site web [www.panorama-ifpen.fr](http://www.panorama-ifpen.fr).

## Récompense

• Le Comité français de mécanique des roches a décerné le prix de thèse Pierre Londe 2017 à Bertrand Paul, doctorant IFPEN, pour sa thèse en géomécanique, réalisée en collaboration avec EDF R&D et l'université de Lorraine.

## Prochains événements scientifiques

• Les Rencontres scientifiques d'IFP Energies nouvelles **Solid Liquid Interfaces, Molecular Aspects for Industrial Applications [SLIMAIA]**, 27 au 29 mars 2018, IFPEN Rueil-Malmaison - [www.rs-slimaia.com](http://www.rs-slimaia.com)

• Workshop **Commodities and Energy Market Organization in the Energy Transition Context [EM 2018]**, 18 et 19 juin 2018, Rueil-Malmaison - [www.ws-em2018.com/](http://www.ws-em2018.com/)

## Publications

• La direction scientifique d'IFPEN a publié sa brochure 2017 « IFP Energies nouvelles, fundamental research serving innovation ». À retrouver au format pdf sur le site web d'IFPEN : [www.ifpen.fr](http://www.ifpen.fr).

• Contribution d'IFPEN à un ebook de The Conversation – média en ligne gratuit – pour mieux comprendre les enjeux et les défis de la transition énergétique – [www.theconversation.com/fr](http://www.theconversation.com/fr)

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

## Contacts :

Direction scientifique : Tél. : +33 1 47 52 51 37 - [Science@ifpen.fr](mailto:Science@ifpen.fr)  
Presse : A.-L. de Marignan - Tél. : 01 47 52 62 07

1 et 4, avenue de Bois-Préau - 92852 Rueil-Malmaison Cedex - France