



Science@ifpen

N°7 - Mai 2011

Les moteurs diagnostiqués grâce au laser



Depuis plusieurs années, nous publions dans cette lettre les derniers résultats scientifiques obtenus par nos chercheurs. Ce numéro ne fait pas exception. Il se

distingue cependant par l'actualité dans laquelle il s'inscrit. En effet, l'IFP a changé de nom et s'appelle désormais IFP Energies nouvelles (IFPEN). Ce changement reflète l'évolution de notre stratégie, initialement principalement orientée vers les hydrocarbures et aujourd'hui consacrée en grande partie aux nouvelles technologies de l'énergie (véhicules hybrides et électriques, biocarburants, chimie verte, captage et stockage du CO₂, etc.). Prolongeant cette démarche, Science@ifp change à son tour de nom pour devenir Science@ifpen. Cependant, au-delà des ruptures technologiques nécessaires pour conduire ces changements, on notera une grande continuité dans l'approche proposée par IFPEN. Car la volonté de générer des innovations qui anime les chercheurs d'IFPEN depuis sa création, l'a conduit à développer des compétences d'exception aujourd'hui au service de ces nouveaux challenges. C'est ce que l'on pourra constater en découvrant les travaux présentés dans cette lettre.

Bonne lecture !

Sophie Jullian, Directeur scientifique

Le développement de moteurs de plus en plus efficaces et propres nécessite des mesures précises de la température des gaz dans la chambre de combustion. En effet, la température influence ou contrôle directement la formation du mélange air-carburant, l'auto-inflammation et la formation des polluants. Cette mesure est rendue difficile par l'environnement moteur. De plus, la très grande sensibilité à la température des phénomènes étudiés impose un très haut niveau de précision.

Non intrusives, les techniques de diagnostics optiques sont particulièrement bien adaptées pour obtenir de telles informations. En particulier, de nombreuses études ont montré le potentiel de la fluorescence induite par laser pour la mesure de température. Cependant, son application dans le cas d'un jet diesel, caractérisé par de forts gradients en température, reste un véritable défi.

C'est dans ce contexte qu'IFPEN a développé cette technique dans une cellule haute pression permettant de reproduire les conditions thermodynamiques du moteur diesel. Une méthodologie originale a été mise en place afin d'optimiser à la fois le montage expérimental, le traitement des images et l'erreur de mesure,

et quantifier cette dernière. Les résultats obtenus se sont montrés très satisfaisants. Des mesures jusqu'à des températures de 700K, avec une précision de $\pm 20K$ et une erreur systématique inférieure à $\pm 30K$, ont été réalisées. Il s'agit là d'une première étape prometteuse qui doit se poursuivre au travers du développement de la technique vers des mesures simultanées de la température et de la concentration en carburant et en oxygène, pour une compréhension encore plus fine des phénomènes physiques en jeu. ■

Température/K

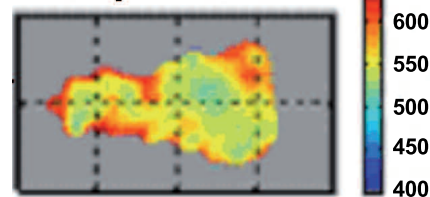


Image de température dans un jet diesel non réactif par fluorescence induite par laser.

R.Devillers, G.Bruneaux, C.Schulz, *Appl. Phys.* 96 (2009) 735-739

G.Tea, G.Bruneaux, J.Kashdan, C.Schulz, *Proc. Combust. Inst.* 30 (accepté pour publication - 2010)

contacts scientifiques :

gilles.bruneaux@ifpen.fr
gabrielle.tea@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.



Atomisons les aluminosilicates !

Outre leur intérêt conceptuel, les solides à porosité uniforme et organisée (matériaux dits mésostructurés) et/ou hiérarchisée (gamme de porosité variable de la micro à la macroporosité) présentent un potentiel important pour l'industrie des catalyseurs, soucieuse de développer des produits toujours plus performants et plus verts.

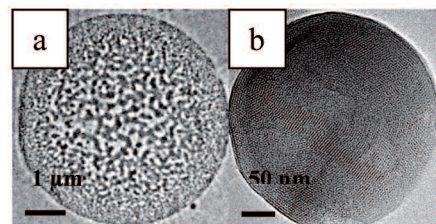
C'est pour répondre à cet enjeu qu'IFPEN et le Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris (LCMCP) collaborent depuis 2002. Adoptant une approche originale, ils ont parié sur une technologie particulière : l'atomisation (ou aérosol).

Ils ont ainsi obtenu, en une seule étape de synthèse et grâce à un outil fonctionnant en continu, des aluminosilicates mésostructurés à forte teneur en aluminium, des solides composites constitués de nanocristaux de zéolithes piégés dans

une matrice mésostructurée et des aluminosilicates micro, méso et macroporeux, structurés ou non.

Cette technologie présente un double intérêt. D'une part, elle permet de créer une multitude de solides. D'autre part, elle semble compatible avec des enjeux de production industrielle. En outre, les propriétés inhabituelles d'acidité de certains des matériaux ainsi obtenus, en rupture avec celles des solides acides utilisés industriellement en catalyse, laissent entrevoir de nouveaux axes de recherche et développement dans les domaines des matériaux innovants et de la catalyse.

Une perspective prometteuse dans un contexte énergétique tendu où la réponse à nos besoins est plus que jamais liée à l'innovation technologique. ■



a) Particule à porosité hiérarchisée, mésoporeuse sur les bords, macroporeuse à cœur.

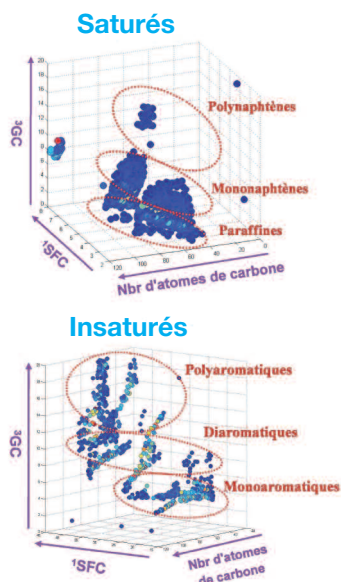
b) Particule mésostructurée avec des pores cylindriques répartis de façon périodique dans la matière.

A. Chaumonnot, F. Tihay, A. Coupé, S. Péga, C. Boissière, D. Grosso, C. Sanchez, *Oil and Gas Science and Technology-Rev. IFPEN*, 64, 6 (2009) 681. DOI: 10.2516/ogst/2009029.

S. Péga, C. Boissière, D. Grosso, T. Azais, A. Chaumonnot, C. Sanchez, *Angew. Chem. Int. Ed.* 48 (2009) 2784. DOI: 10.1002/anie.200805217.

contact scientifique :
alexandra.chaumonnot@ifpen.fr

Les distillats sous vide comme on ne les a jamais vus



Chromatogrammes 3D issus de l'analyse d'un distillat sous vide par couplage SFC / GC2D-HT.

Dans un contexte d'augmentation de la demande en énergie et de plafonnement prévisible des ressources fossiles, il est essentiel de convertir le maximum de pétrole en carburant. Pour cela, les

procédés de conversion des distillats sous vide jouent un rôle majeur. Or, leur étude et leur optimisation, qui passent par la modélisation cinétique, souffrent du manque de données analytiques détaillées. En effet, alors qu'on dispose d'une information moléculaire précise sur les coupes légères, les informations structurales sont faibles pour les distillats sous vide, notamment en raison du nombre de constituants (plus d'un million).

Récemment, la chromatographie en phase gazeuse bidimensionnelle haute température (GC2D-HT) a permis des avancées pour leur caractérisation. Cependant, deux dimensions de séparation ne permettent pas d'atteindre un niveau de détail suffisant.

C'est pourquoi une instrumentation 3D, couplant la chromatographie à fluide supercritique (SFC) et la GC2D-HT, a été élaborée récemment au sein d'IFPEN. La SFC apporte en effet une sélectivité

décisive pour la séparation par structure chimique. Une représentation 3D des composés hydrocarbonés peut ainsi être obtenue.

Ces données très détaillées permettront une étude plus pertinente des procédés de conversion. La technologie développée pourrait également être envisagée pour l'analyse d'autres matrices complexes, comme celles issues de la biomasse. ■

T. Dutriez, M. Courtiade, D. Thiébaud, H. Dulot, F. Bertoncini, J. Vial, et al., *HT-2D-GC of hydrocarbons up to nC (60) for analysis of vacuum gas oils*, *J. Chrom. A*, 1216, (2009) p.2905-2912. DOI : 10.1016/j.chroma.2008.11.065

T. Dutriez, M. Courtiade, D. Thiébaud, H. Dulot, F. Bertoncini, et al., *Extended characterization of a vacuum gas oil by offline LC-HT-2D-GC*, *J. Sep. Sci.*, 33 (2010) p.1787-1796. DOI : 10.1002/jssc.201000102

contacts scientifiques :
marion.courtiade@ifpen.fr
thomas.dutriez@ifpen.fr

Les biocarburants s'appuient sur le champignon

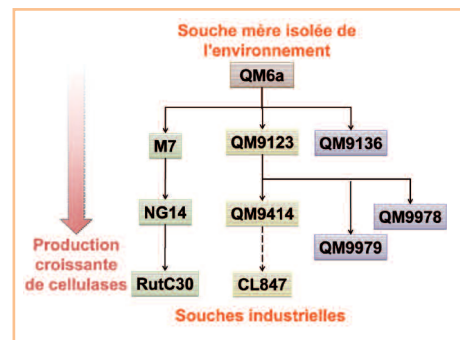
La production de bioéthanol de 2^e génération nécessite l'action d'enzymes, généralement issues du champignon filamenteux *Trichoderma reesei*. Ces enzymes sont obtenues par culture en fermenteur de ce champignon. Cette culture est cependant encore trop coûteuse, et l'une des voies explorées pour diminuer ce coût est d'améliorer les performances des souches de *T. reesei* par ingénierie génétique.

Le défi, pour le généticien moléculaire, est d'identifier parmi les milliers de gènes de l'organisme ceux qu'il faudra modifier pour améliorer la souche. Pour cela, il s'appuie sur les techniques de la génomique et de la biologie systémique, qui permettent de collecter l'ensemble des informations cellulaires [séquence de l'ADN, expression des gènes dans une condition de culture donnée, etc.]. Il peut ainsi établir un modèle prédictif du comportement du micro-organisme.

En collaboration étroite avec l'ENS Paris et plusieurs laboratoires en Europe et aux États-Unis, des chercheurs d'IFPEN ont déchiffré le génome d'une lignée complète de souches de *T. reesei*. Ils ont obtenu pour la première fois une liste exhaustive des mutations affectant ces souches.

Ce travail est actuellement complété par des études d'expression génétique (transcriptome) de *T. reesei*. Ces informations constitueront la base d'un modèle de fonctionnement permettant d'assister les choix en ingénierie génétique, pour l'obtention des souches plus performantes.

Ces avancées contribueront ainsi à diminuer le coût de la production de biocarburant de 2^e génération. ■



Exemple de lignées de souches de *T. reesei*. L'étude comparative de leur génome permet d'identifier les gènes clés dans la production de cellulases.

S. Le Crom, W. Schackwitz, L. Pennacchio, JK. Magnusone, DE. Culley, JR. Collett, J. Martin, IS. Druzhinina, H. Mathis, F. Monot, B. Seiboth, B. Cherry, M. Rey, R. Berka, CP. Kubicsek, SE. Baker, and A. Margeot, *Proc. Nat. Sci. USA*, Volume 106, n°38, pp 16151-16156. DOI : 0.1073/pnas.0905848106

contacts scientifiques :
antoine.margeot@ifpen.fr
frederic.monot@ifpen.fr

Du CO₂ bien stocké

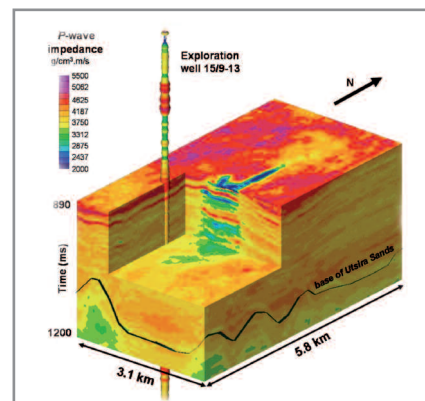
Il est primordial de suivre l'évolution du CO₂ injecté dans un réservoir géologique afin de s'assurer de l'intégrité du stockage au cours du temps et d'affiner les modèles de simulation. Parmi les différentes méthodes géophysiques (sismique, gravimétrie, électromagnétisme), la sismique répétitive est aujourd'hui le moyen le plus efficace pour remplir ces deux objectifs. À condition de pouvoir interpréter les variations des propriétés sismiques du sous-sol dues à l'injection de CO₂ entre deux acquisitions de données séparées dans le temps.

Les géophysiciens de la direction Géologie-Géochimie-Géophysique d'IFPEN viennent de réaliser une première en adaptant au contexte du stockage géologique de CO₂ des techniques d'interprétation développées pour caractériser les réservoirs pétroliers. Dans le cadre du projet européen FP6 CO₂ReMoVe, ces techniques ont été appliquées aux données sismiques enregistrées sur le

site de Sleipner (mer du Nord - Norvège) lors des campagnes de 1994 et 2006 (avant et après injection de CO₂). Les variations d'impédances sismiques obtenues permettent de suivre l'évolution 3D du panache de CO₂ dans l'aquifère salin hôte.

Les résultats obtenus sont en cours d'exploitation pour quantifier le CO₂ stocké dans l'aquifère. Leur comparaison avec les simulations du réservoir permettra de renforcer les prévisions de comportement du site de stockage sur plusieurs centaines d'années. Plus largement, l'expérience acquise grâce au développement et au déploiement de ces nouvelles technologies sur les premiers sites permettra d'établir des recommandations pour la gestion des sites de stockage géologique de CO₂. ■

contact scientifique :
noalwenn.sallee@ifpen.fr



Vue 3D de la distribution des impédances des ondes P, obtenue après inversion sismique des données acquises en 2006. Le CO₂ est identifié par des valeurs d'impédances plus faibles (couleurs bleu et vert) à l'intérieur du réservoir (d'après Clochard et al. First Break 2010).

T. Tonellot, M.-L. Bernard and V. Clochard, 2010. Method of joint inversion of seismic data represented on different time scales, US Patent 2010/0004870 A1.

N. Delépine, V. Clochard, K. Labat, P. Ricarte, 2010. Post-stack stratigraphic inversion workflow applied to carbon dioxide storage: application to the saline aquifer of Sleipner field, accepted in Geophysical Prospecting. DOI: 10.1111/j.1365-2478.2010.00905.x

Les particules sortent leurs griffes !

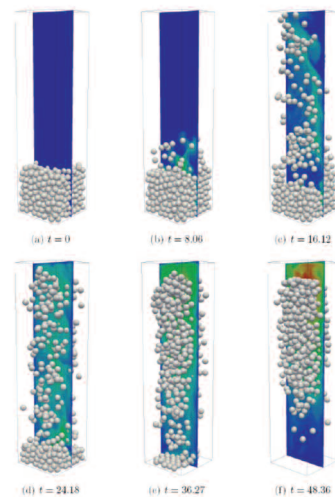
Du transport de sable dans les conduites de production aux lits fluidisés dans les réacteurs catalytiques, les écoulements fluide/particules sont présents dans un grand nombre d'applications étudiées par IFPEN. Leur importance scientifique, industrielle et économique rend leur compréhension essentielle.

Cependant, leur étude est délicate en raison de l'amplitude d'échelle considérée, allant du grain de sable au pipeline de plusieurs centaines de kilomètres, ou des fines charges au craqueur catalytique fluidisé de plusieurs mètres. Il est donc primordial de décrire précisément les interactions entre les particules et le fluide porteur à l'échelle micro, afin d'être en mesure de modéliser de manière satisfaisante le comportement global à l'échelle macro.

Depuis plusieurs années, IFPEN développe des codes de calcul 3D massivement parallèles pour simuler directement cette échelle micro : GRAINS3D pour les collisions interparticules et PeliGRIFF pour le couplage hydrodynamique. Utilisés sur de puissants supercalculateurs, ces codes permettent de modéliser jusqu'à 100 000 particules couplées avec un fluide et plusieurs millions en granulaire sec.

Le développement de PeliGRIFF s'intègre ainsi dans une approche de simulation multi-échelle. Les prochains travaux se concentreront sur les méthodes d'intégration des résultats pour le changement d'échelle. ■

contacts scientifiques :
anthony.wachs@ifpen.fr
guillaume.vinay@ifpen.fr



Remise en suspension de 500 catalyseurs sphériques par convection naturelle : évolution temporelle de la température.

A. Wachs, A DEM-DLM/FD method for direct numerical simulation of particulate flows: Sedimentation of polygonal isometric particles in a Newtonian fluid with collisions. *Computers & Fluids*, 38(8), 1608-1628, 2009. DOI:10.1016/j.compfluid.2009.01.005

G. Vinay, A. Wachs, V. Hergault, DNS of particulate flows with collisions using a parallel DEM-DLM/FD method: PeliGRIFF, 9th European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD 2010, Lisbon, Portugal.

Photos : © IFPEN, X

Nominations

• **Olivier Appert**, Président d'IFPEN, a été élu début 2011 Président du Conseil français de l'énergie (CFE), en remplacement d'Anne Lauvergon.

• **Sophie Jullian**, Directeur scientifique d'IFPEN et Présidente du Conseil scientifique du pôle de compétitivité Axelera, a été élue Présidente du conseil scientifique de l'École Normale Supérieure (ENS) de Lyon le 14 juin 2010, en remplacement de Jacques Samarut et sur proposition de ce dernier. Elle a également été nommée au conseil scientifique de l'Inra le 7 janvier 2011.

Ouvrages

F. Lecomte – *Le Captage du CO₂ – Des technologies pour réduire les émissions de gaz à effet de serre* – Éditions Technip – ISBN 9782710809388 (Version anglaise : *CO₂ Capture Technologies to Reduce Greenhouse Gas Emissions*)

Alain-Yves Huc – *Heavy Crude Oils – From Geology to Upgrading. An Overview* – Editions Technip – ISBN 978271080890

Distinctions

• **Jérémie Dautriat** a reçu le 28 mai 2010 l'un des prix de thèse de l'École Polytechnique 2010, pour la qualité de sa thèse portant sur le "Comportement hydro-mécanique de roches réservoir sous contraintes – Relations entre évolutions de perméabilité et échelles des mécanismes d'endommagement". Placée sous la direction académique de Jean Raphanel et Alexandre Dimanov du Laboratoire de mécanique des solides de l'École Polytechnique, cette thèse a été encadrée au sein d'IFPEN par Nicolas Gland.

• **Pascal Raybaud**, Expert au sein de la direction Catalyse et Séparation, a obtenu le prix de la division Catalyse de la Société chimique de France. Ce prix récompense des travaux importants de recherche menés depuis 1995, permettant la rationalisation et la conceptualisation des propriétés de catalyseurs hétérogènes et homogènes à l'échelle atomique, grâce à la modélisation moléculaire quantique couplée aux techniques expérimentales.

• **François Roure**, Expert à la direction Géologie-Géochimie-Géophysique, a reçu le Wegener Award 2010 attribué par l'EAGE (European Association of Geoscientists and Engineers) en reconnaissance de sa contribution de chercheur dans la compréhension de phénomènes liés aux zones de chevauchement et aux bassins d'avant pays, et des effets de la tectonique compressive sur les mouvements de fluides.

• **Christian Wittrisch** a reçu le 17 janvier 2011 le Prix spécial du jury à l'occasion de la remise du 10^e Prix Chéreau-Lavet 2010 de l'ingénieur inventeur. Il est distingué pour l'invention du Simphor, système d'instrumentation et de mesures dans un puits horizontal, déjà primé à deux reprises et commercialisé par Vinci Technologies.

• **Prix de thèse Yves Chauvin 2010 d'IFP Energies nouvelles** : le prix a été attribué à Ludovic Metvier, ancien doctorant chez IFPEN, pour sa thèse "Une méthode d'inversion non linéaire pour l'imagerie sismique haute résolution", dirigée par le professeur Laurence Halpern (Université Paris 13) et encadrée à IFPEN par Florence Delprat-Jannaud.

• **Prix de thèse 2010 de la Société Chimique de France** : le prix a été attribué à Frédéric Biscay, ancien doctorant chez IFPEN, pour sa thèse "Modélisation moléculaire d'interfaces liquide-vapeur à haute pression et prédiction de la tension interfaciale" dirigée par le professeur Patrice Malfreyt (Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand) et encadrée à IFPEN par Véronique Lachet et Philippe Ungerer.

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 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. Ragil - Tél. : 01 47 52 58 75