

Vers des transports décarbonés : carburants, combustion et post-traitement pour les transports routiers

Sophie Jullian est directrice scientifique de l'Institut Français du Pétrole Énergies Nouvelles¹ (IFPEN).

La chimie est une des sciences fondamentales mises en jeu pour faire progresser la question du transport. Dans cet ouvrage, le **Chapitre de S. Candel** le met en évidence en ce qui concerne la combustion (motorisations thermiques), mais c'est vrai de façon plus générale. En effet, quels qu'ils soient, les véhicules ont besoin d'énergie pour remplir leur usage de mobilité. Et l'énergie, c'est avant tout de la chimie – puisqu'elle est associée à la transformation de la matière et provient de la rupture de liaisons à l'échelle moléculaire. Ainsi, si l'on

veut remonter aux sources de l'énergie disponible sur la Terre, on aboutit invariablement à l'énergie solaire qui a permis, par le phénomène de photosynthèse, de créer des liaisons entre atomes de carbone, à partir de la rupture des liaisons carbone-oxygène du gaz carbonique et oxygène-hydrogène de l'eau – autant de phénomènes entièrement chimiques. C'est la photosynthèse qui par ces transformations a produit toute la biomasse, laquelle a donné naissance au pétrole et au charbon ; c'est l'énergie de cette liaison

1. www.ifpenergiesnouvelles.fr

carbone-carbone que l'on récupère en brûlant les combustibles fossiles. Ainsi, le lien entre chimie et transport apparaît tout naturellement au travers des considérations énergétiques.

Depuis ses origines, l'histoire des transports est également indissociable de la notion d'efficacité énergétique : afin de diminuer la quantité d'énergie nécessaire pour un déplacement donné. En effet, la capacité à déplacer des biens et des personnes par l'usage efficace de ressources est l'un des fondements de notre civilisation actuelle et c'est par exemple la disponibilité d'énergies fossiles liquides, à fort contenu énergétique, qui a permis l'essor de la mobilité individuelle. Cependant, « diminuer la quantité d'énergie » ne se limite pas à diminuer la consommation de carburant ; il faut aller au delà et donc regarder l'ensemble du cycle qui conduit à minimiser l'impact de cette utilisation de carburant sur l'écosystème global de la planète. Ceci amène à prendre en considération les couplages importants entre

les transports et des questions de portée plus large, comme l'impact environnemental ou la disponibilité des ressources.

1 Le contexte de l'évolution des transports

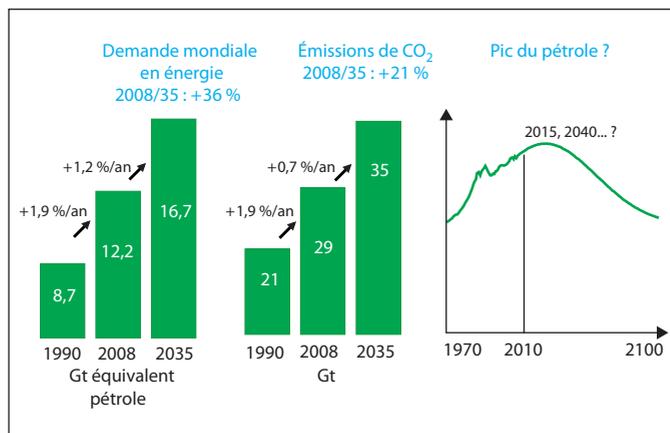
1.1. Besoins et utilisation des énergies

Le contexte énergétique dans lequel nous vivons impose de réduire la dépendance vis-à-vis des énergies fossiles, par nature finies ; c'est pourquoi il faut diversifier les sources d'énergie. En parallèle s'impose aussi la nécessité de contrôler le réchauffement climatique en s'attaquant aux rejets de gaz à effet de serre. Par ailleurs, évidemment, il reste fondamental d'accompagner les besoins et les usages de la mobilité, dont la société fait de plus en plus usage.

La **Figure 1** présente des projections de la demande totale en énergie, des émissions de CO₂ et de la production de pétrole. Le monde requiert de

Figure 1

La question de l'énergie entre la demande énergétique mondiale, les émissions de CO₂ et le peak oil.



plus en plus d'énergie mais à partir de ressources fossiles, cela conduit à de plus en plus d'émissions de CO₂.

Premier défi : il faut maîtriser cette évolution pour éviter des catastrophes climatiques et environnementales comme par exemple le réchauffement climatique ou l'acidification des océans. La question de la disponibilité des ressources constitue un **deuxième défi**. Elle est résumée par la notion de « peak oil », qui marque le moment où s'amorcera une décroissance des réserves fossiles connues ou escomptées. Même si la date précise de ce peak oil – qui englobe toutes les ressources fossiles, pétrole et gaz, qu'ils soient ou non conventionnels – reste incertaine, elle se situe à un horizon assez proche selon la plupart des scénarios (certains considèrent même qu'on l'a déjà franchi !).

1.2. La demande en mobilité est en forte croissance

La **Figure 2** illustre la corrélation entre la mobilité et l'évolution du PIB, par comparai-

son avec l'accroissement de la consommation d'électricité. L'amélioration du PIB des pays émergents – donc de leur niveau de vie – se traduit naturellement par un accroissement de leur demande en énergie électrique (courbe orange), pour des usages domestiques visant à l'amélioration de la qualité de vie. Mais l'accroissement est encore plus marqué pour la consommation liée au surcroît de demande pour la mobilité (courbe rouge). Derrière ce constat, se dessine l'extension du modèle de société occidental qui a fait du libre accès à la mobilité individuelle un de ses fondements.

1.3. Dans quelle mesure peut-on compter sur les motorisations alternatives ?

Malgré les efforts importants qui sont faits pour développer des motorisations alternatives (moteurs électriques, moteurs hybrides) et malgré les succès techniques auxquels on peut encore s'attendre de ce point de vue, les moteurs thermiques (conventionnels) resteront très largement

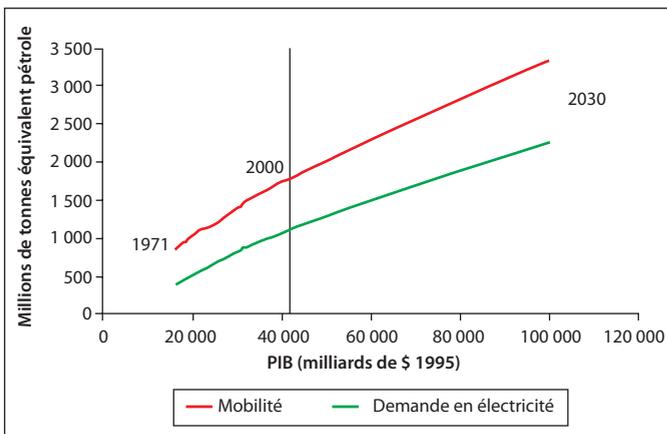


Figure 2

Impact du PIB sur la demande énergétique.

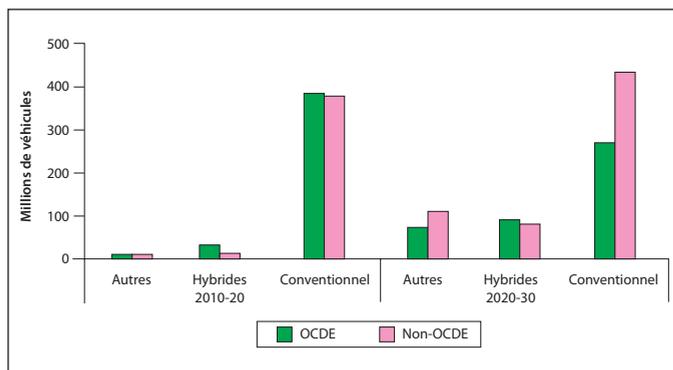


Figure 3

Taux de véhicules alternatifs ou traditionnels dans les pays occidentaux et émergents pour 2010-2020 et 2020-2030.

majoritaires dans les décennies à venir, à l'échelle planétaire, tirés notamment par les besoins des pays émergents. En effet, même s'il se dessine une tendance forte sur les pays occidentaux à aller vers des solutions à l'efficacité énergétique accrue, via l'hybridation et des motorisations alternatives, cette tendance mettra davantage de temps à apparaître dans les pays émergents. Cette situation est résumée sur la **Figure 3**, issue d'une publication de l'OCDE².

Ces tendances générales ressortent aussi d'une étude de prospective récente du World Energy Council. Deux scénarios extrêmes y ont été envisagés : l'un dit « régulé » grâce à des actions incitatives ou dissuasives des États (**Figure 4A**), l'autre « dérégulé » (**Figure 4B**). Ces figures représentent, dans chacun des scénarios, l'évolution à 2050 de la répartition entre les modes de motorisation utilisés pour les véhicules terrestres. Les rectangles rouges (voitures électriques) et gris (voitures à pile à com-

bustibles) sont ce que nous avons appelé les motorisations alternatives ; tous les autres utilisent en totalité ou en partie des motorisations thermiques alimentées par des carburants constitués d'hydrocarbures liquides.

Dans le scénario dérégulé, celui où aucune contrainte forte ne vient orienter les choix des usagers, il n'y a quasiment que le véhicule à motorisation traditionnelle qui apparaît ; en revanche, s'il y a un accompagnement réglementaire (scénario régulé), on observe alors l'émergence progressive d'une proportion de véhicules alternatifs. Toutefois, même dans ce cas, cette proportion restera à un niveau modéré : vraisemblablement moins de 10 % du marché en 2030. Même s'il ne s'agit que de scénarios prévisionnistes, on peut considérer qu'ils fixent tout de même le cadre d'un avenir probable sur lequel se fonde la justification des axes de recherche et des moyens qui y sont consacrés. Or, à cet égard, il faut bien constater que la solution du problème de l'énergie dans les transports ne reposera pas seulement sur l'arrivée des motorisations alternatives. La priorité d'action pour améliorer les motorisations conventionnelles se justifie à la fois pour des questions de ressource (efficacité énergétique et rejet de CO₂) du fait de l'urgence relative qu'il y a à maîtriser les émissions de CO₂ (voir ci-après), mais aussi pour des questions environnementales (émissions polluantes et qualité de l'air) qu'il ne faut pas négliger.

2. Global Transport Scenarios 2050 – World Energy Council, 2011.

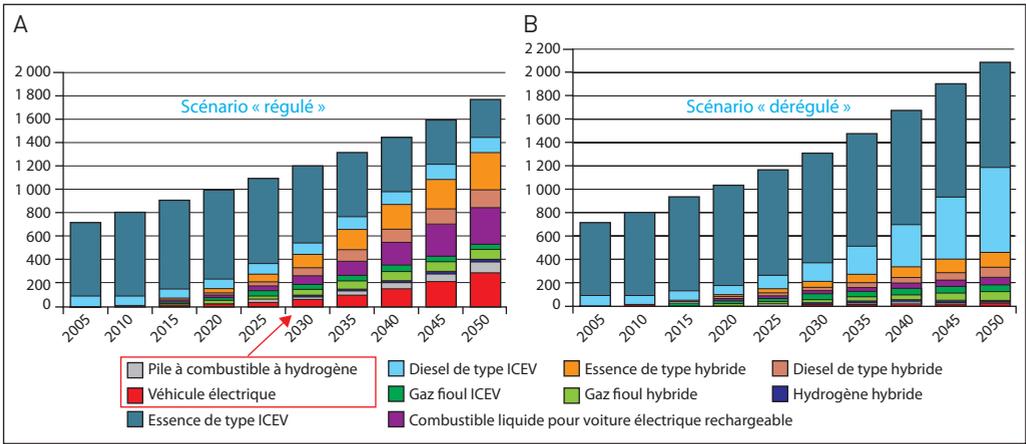


Figure 4

A) Évolution du mix énergétique pour la mobilité (cas régulé). Le déploiement de solutions « exemptes de thermique » va se situer durablement entre marginal et modéré (< 10 % dans le monde en 2030).
 B) Évolution du mix énergétique pour la mobilité (scénario dérégulé).
 ICEV = « Internal Combustion Engine Vehicle » (véhicule avec moteur à combustion interne).

2 Les recherches pour l'amélioration des motorisations et la diversification des ressources en carburant

Un champ de progrès important pour les motorisations conventionnelles se trouve dans l'amélioration de leur efficacité, comme l'illustre la **Figure 5** tirée d'une publication de l'Agence internationale de l'énergie³ (AIE).

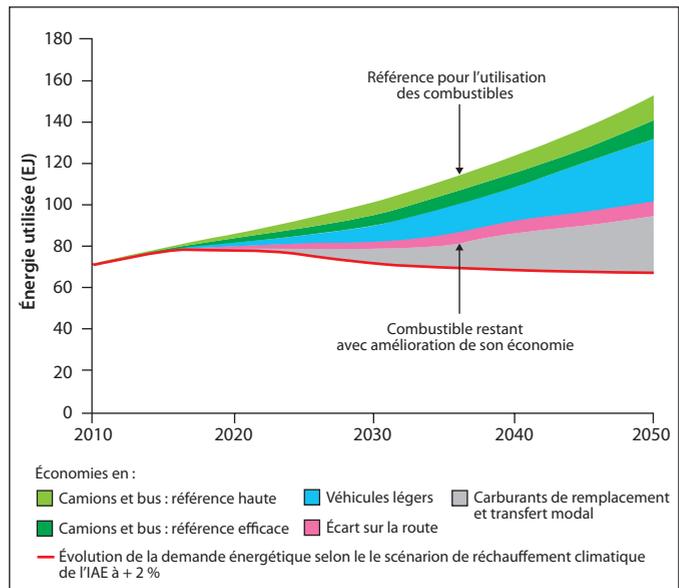
Celle-ci fournit une indication du poids énergétique de différentes formes de mobilité, dont il ressort que le transport routier offre une marge de gain considérable. En accroissant l'efficacité des motorisations associées, on peut donc espérer des réductions importantes des émissions de CO₂ qui seront déterminantes pour l'objectif de limitation du réchauffement climatique.

La **Figure 6** fournit par ailleurs une présentation des différentes **sources pri-**

maires d'énergie conduisant à une diversité des **solutions énergétiques** pour les motorisations. D'un côté, plusieurs ressources alimentent la production de nombreux vecteurs énergétiques utilisables pour mettre en œuvre la mobilité. De l'autre, différentes motorisations mettent en jeu un ou plusieurs de ces vecteurs. La multiplicité de

Figure 5

Évolution dans le temps de l'énergie nécessaire à fournir selon les véhicules.



3. Technology Roadmap - Fuel Economy of Road Vehicles/AIE - 2012.

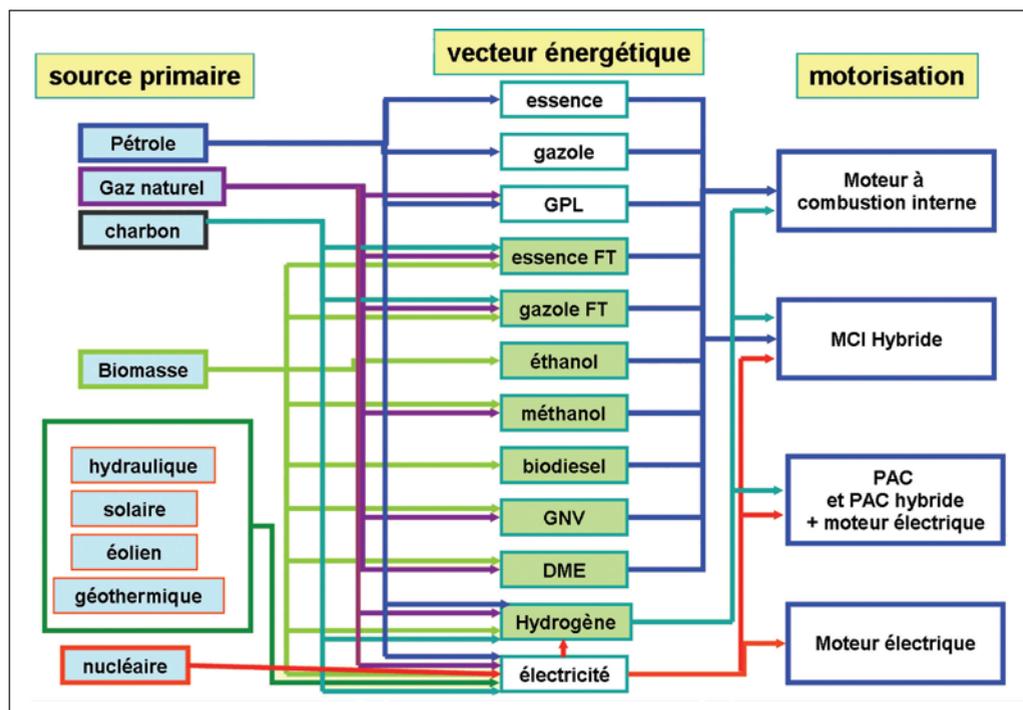


Figure 6

Panorama des ressources et des vecteurs énergétiques pour les différentes formes de motorisation.

ces derniers et des chemins possibles, qui sont autant de filières, met en évidence la diversité des voies possibles et pointe ainsi les besoins en R&D pour arriver aux solutions requises, voies pour lesquelles la chimie est une clé d'entrée majeure.

Les progrès accomplis au cours des deux dernières décennies ont permis de réduire bien entendu les rejets polluants en Europe, grâce aux règlements édictés (aujourd'hui Euro V), mais aussi la consommation des véhicules et donc les émissions de CO₂. On observe donc que ces améliorations ont été supérieures depuis 2001, essentiellement sous l'impulsion de la réglementation (voir l'**Encart : « Axes de progrès pour les motorisations thermiques »**).

Si la nature et la qualité des carburants contribuent significativement à la réduction des émissions de polluants, dans le cas du CO₂, une part essentielle des progrès est venue d'avancées dans les technologies « moteur ». Comme indiqué dans cet encart, différents axes d'innovation ont contribué à ce résultat, aussi bien pour les moteurs à essence que diesel.

L'amélioration des carburants se fait d'une part dans une logique de meilleure adéquation avec les nouvelles technologies de moteur pour permettre leur fonctionnement optimal. On est alors dans une démarche d'évolution continue des formulations. Il peut aussi s'agir de proposer des formulations avancées plus complexes qui seront élaborées pour permettre le

meilleur fonctionnement possible de moteurs utilisant de nouveaux modes de combustion, comme par exemple la combustion diesel homogène. Cependant, le contexte réglementaire est l'un des drivers principaux de ces évolutions, aboutissant à des contraintes de formulation de plus en plus sévères pour les carburants.

Un autre axe de progrès, motivé par la finitude des ressources fossiles mais aussi sur des critères de durabilité, porte sur l'introduction progressive de carburants alternatifs, plus pérennes ou plus propres (carburant gazeux, biocarburant, carburant synthétique).

Dans tous les cas, bien entendu la chimie et la catalyse sont des disciplines essentielles : pour adapter les procédés tant aux nouvelles exigences réglementaires qu'aux nouvelles ressources, comme dans le cas des biocarburants, mais aussi pour en concevoir de nouveaux ou pour optimiser ceux existant d'un point de vue du coût énergétique (voir l'**Encart : « Recherches sur les carburants à l'IFPEN »**).

L'utilisation croissante du gaz naturel véhicule (GNV) appellera aussi de plus en plus de développements faisant appel à la chimie et au génie des procédés, pour amener ce type de carburant aux standards requis et pour optimiser les motorisations correspondantes.

2.1. Les biocarburants

Les biocarburants, issus de la biomasse, sont une forme déjà très avancée de carbu-

AXES DE PROGRÈS POUR LES MOTORISATIONS THERMIQUES

Essence

Distribution variable : - 10 %

Injection directe - combustion par auto-inflammation : - 15 %

Injection directe d'essence - downsizing : - 25 %

Hybridation et moteur optimisé : - 40 %

Diesel

Downsizing : - 10 %

Hybridation et moteur optimisé : - 30 %

rants non fossiles puisque la 1^{re} génération est déjà sur le marché, en mélange avec les carburants traditionnels. Ce sont d'un côté l'**éthanol pour la filière essence**, et d'autre part les esters d'**huiles végétales** pour le **gazole**.

D'importants efforts sont actuellement consacrés au développement des nouvelles générations de biocarburants liquides, mais il faut aussi garder à l'esprit que les biocarburants peuvent aussi être gazeux, par exemple le biogaz, le bioDME (diméthyléther), ou bien encore l'hydrogène bio-sourcé. Pour l'accès au marché, on peut donc imaginer qu'à un horizon plus ou moins lointain, les biocarburants liquides se retrouvent concurrencés par ceux-ci, au même titre que par l'électricité.

La **Figure 8** montre l'évolution prévisible des carburants alternatifs d'ici à 2030. On voit que la 1^{ère} génération occupera encore une part significative mais relativement

RECHERCHES SUR LES CARBURANTS À IFPEN

Quelques mots autour des travaux qui ont été menés à IFP énergies nouvelles !

De nombreux travaux ont été menés dans le domaine de la catalyse. Ils ont conduit à une amélioration régulière de la qualité de l'essence. Un certain nombre de nos lecteurs ont connu les essences plombées. Depuis de nombreuses années, il n'y a plus de plomb dans l'essence, sans déperdition en termes de performance. Pour ne pas perdre en performance et puisque le plomb est un booster d'octane*, il a fallu améliorer les indices d'octane des essences, donc modifier la composition moléculaire des essences.

En parallèle à cette modification, il a fallu désulfurer les essences et les gazoles de façon à éliminer les émissions d'oxydes de soufre mais aussi d'éviter l'empoisonnement et la désactivation des catalyseurs de post-traitement des émissions polluantes. Par ailleurs, l'amélioration de la qualité des gazoles est aussi un axe important de travail dans le domaine du raffinage (hydrotraitement, procédé d'hydrocraquage,...). Dans tous ces programmes, il s'agissait de travaux de chimie, de catalyse ; à partir du pétrole, le but était d'avoir des procédés de production d'essence, de gazole ou de kérosène, de meilleure qualité.

Ces recherches ont été bien entendu des travaux de chimie, des travaux traditionnels de catalyse, d'analyse pour mesurer les compositions, caractériser les catalyseurs, les effluents, etc. Mais il faut souligner l'intense utilisation qui est faite de la « chimie computationnelle** », ce qu'on appelle du « *in silico* pre-screening ». Tous les travaux de chimie prédictive à base de modélisation moléculaire jouent un rôle essentiel pour accélérer la mise au point de nouveaux catalyseurs (par exemple le catalyseur de la **Figure 7**).

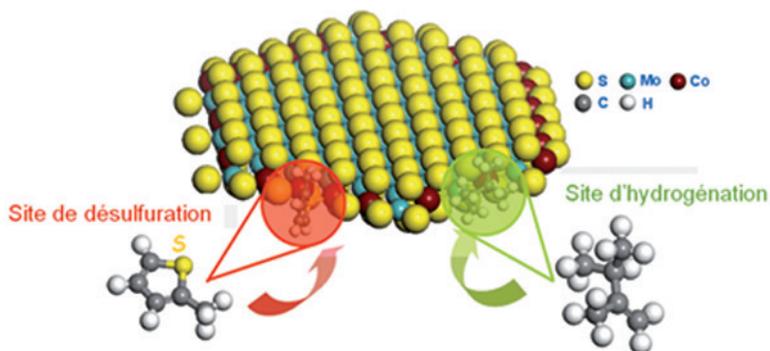


Figure 7

Modélisation à l'échelle atomique des sites actifs d'un catalyseur versatile basé sur des nano-cristallites hexagonaux de CoMoS.

Source : Krebs E., Silvi B., Daudin A., Raybaud P. (2008). *Journal of Catalysis*, **260** : 276.

*Un booster d'octane permet d'améliorer l'indice d'octane d'un carburant. On ajoute des produits anti-détonants (par exemple du tétraéthyle de plomb, maintenant interdit dans le monde entier pour les carburants automobiles, et encore utilisé dans les essences aviation) comme inhibiteur de cliquetis. Ces produits permettent l'utilisation du carburant additivé dans un moteur à plus haut taux de compression, et donc dans un moteur à plus haut rendement.

**La chimie computationnelle (ou chimie numérique, ou chimie informatique) est une branche de la chimie qui utilise les lois de la chimie théorique exploitées dans des programmes informatiques afin de calculer structures et propriétés d'objets chimiques (molécules, solides, surfaces...), appliqués à des problèmes chimiques réels. Les propriétés recherchées peuvent être la structure (géométrie, relations entre constituants), l'énergie totale, l'énergie d'interaction, les charges, fréquences vibrationnelles, réactivité ou autres quantités spectroscopiques...

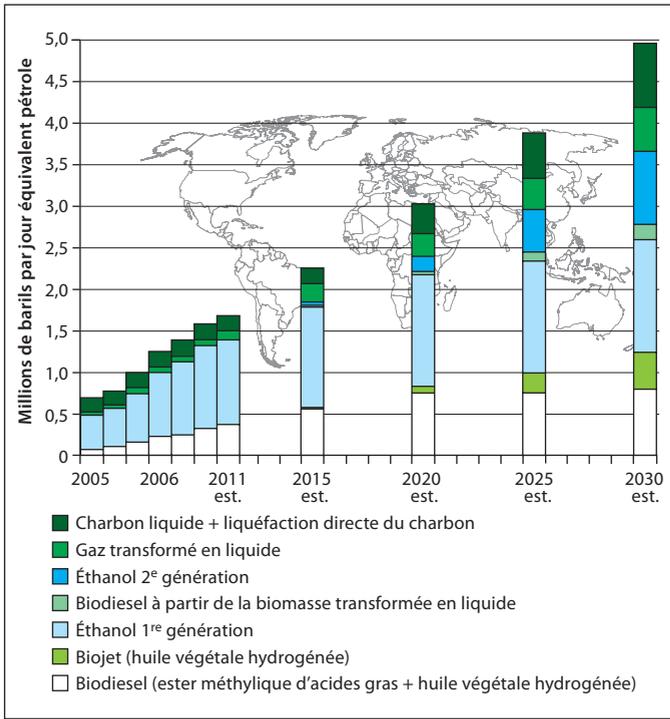


Figure 8

Les carburants alternatifs en 2030 seront en pleine croissance. Ils représenteront près de 10 % des carburants pour transports terrestres (estimation Axens - mai 2011).

stabilisée, tandis que les autres formes s'appuyant sur des ressources qui ne sont pas en compétition avec l'alimentaire devraient représenter une proportion croissante de la demande en carburants pour la mobilité, à la fois terrestre et aérienne. Il existe ainsi plusieurs voies parallèles dont on prévoit le débouché sur le marché malgré leurs contraintes respectives en termes de performance, de coût et d'investissements à l'horizon 2020-2025. Pour produire ces différents carburants, des travaux de recherche importants sont en cours dans le but de développer les procédés.

Aujourd'hui, une grande part de ces travaux porte sur les biocarburants de deuxième génération, qui, au lieu d'utiliser des ressources saccha-

rifères, amylacées ou oléagineuses, utilisent la biomasse **ligno-cellulosique**, c'est-à-dire du bois, de la paille, des matières premières non comestibles, et ne posent pas de problème en termes de concurrence avec les filières alimentaires. Deux voies à forte composante chimique sont étudiées (**Figure 9**) :

- une voie **biochimique** : à l'interface chimie-biologie, cette voie recourt aux biotechnologies pour opérer les transformations de la cellulose, et s'appuie sur des cultures dédiées pour produire de l'éthanol dit de deuxième génération (donc pour la filière essence) ;
- une deuxième voie **thermochimique**, qui consiste à décomposer thermiquement la ressource (paille, bois...) pour aboutir au gaz de synthèse,

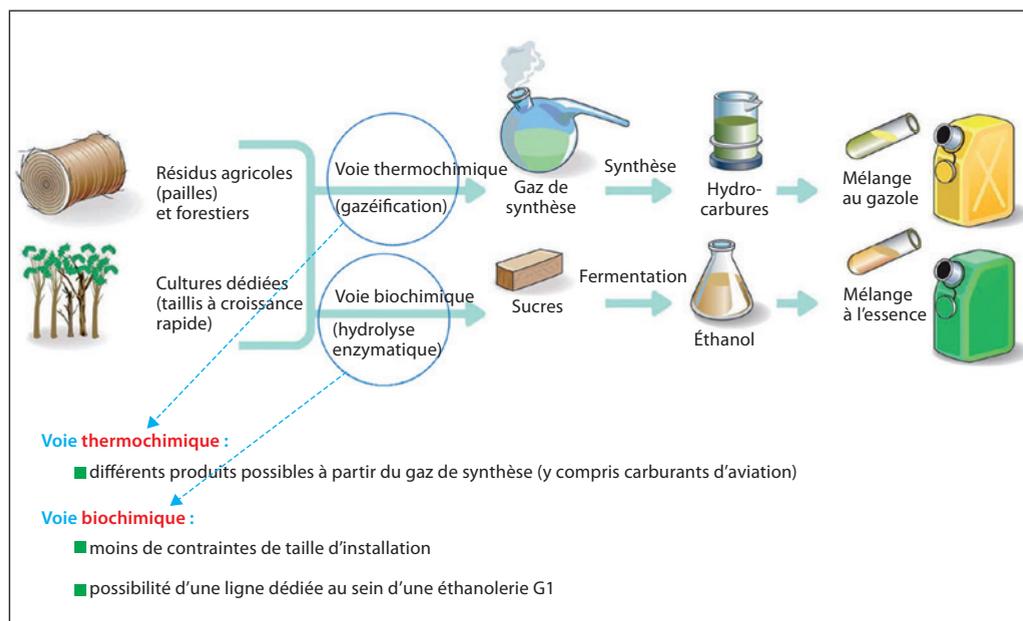


Figure 9

Voies thermodynamique et biochimique de production de biocarburant.

Source : IFPEN

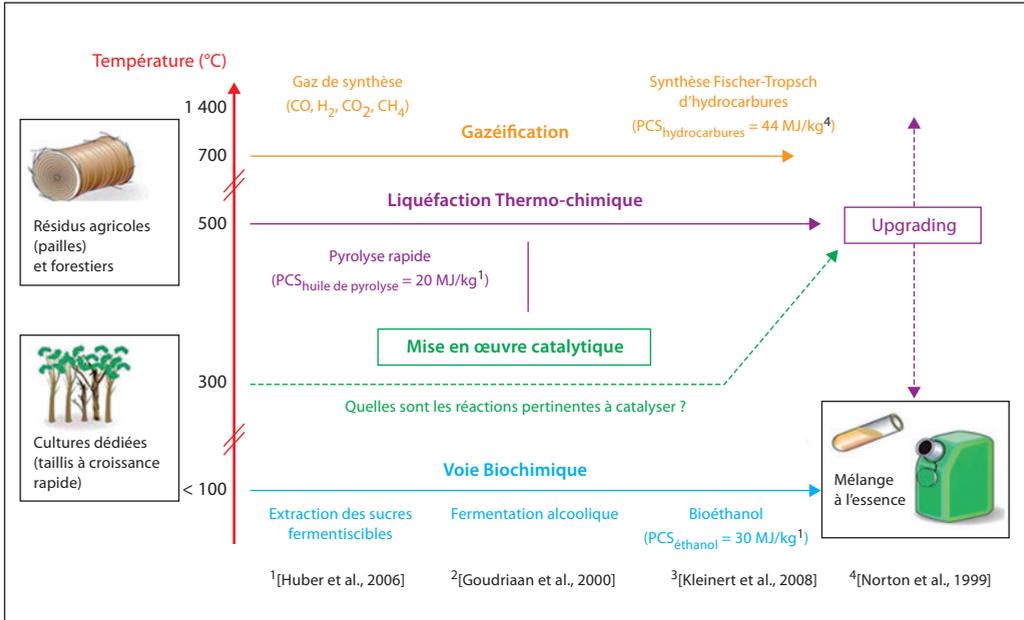
composé de monoxyde de carbone et d'hydrogène, puis pour les recomposer, comme dans un jeu de lego, sous forme d'hydrocarbures de synthèse *via* une synthèse de type Fischer-Tropsch (ce sont les carburants synthétiques appelés Btl, « *biomass to liquids* »). Cette voie, qui fait appel à des conditions de pression et température élevées, est plus énergivore et passe par une phase gaz : elle offre l'avantage de produire des substituts du gazole d'excellente qualité (sans aromatiques, sans soufre) mais aussi des substituts du jet Fuel, puisque il est possible par la chimie de reconstruire des hydrocarbures au choix.

Pour le développement de ces biocarburants de deuxième génération, les objectifs de progrès qui guident la recherche diffèrent (Figure 10). Pour la voie thermochimique,

l'enjeu est avant tout énergétique et autour du bilan carbone, et passe notamment par la voie catalytique, grâce à laquelle il est possible d'abaisser les barrières d'énergie pour la transformation. Mais il s'agit aussi d'améliorer les rendements des procédés, en terme opératoire.

À l'inverse, la voie biochimique, plus douce, requiert surtout des travaux de compréhension et de maîtrise des processus enzymatiques, avec la nécessité de développer une ingénierie de conception/sélection des enzymes les mieux adaptées.

Mais dans les deux cas, l'enjeu économique reste primordial, d'où le besoin d'optimiser l'ensemble des opérations, l'agencement des procédés et leur coût de développement qui pèse aussi sur leur rentabilité.



2.2. L'hydrogène carburant

Le fort contenu énergétique massique de la molécule d'hydrogène (illustré par sa propension à engendrer des réactions explosives lorsqu'il interagit avec l'oxygène), couplé à sa grande abondance sur Terre – puisque c'est l'un des constituants des hydrocarbures... mais aussi de l'eau –, a suffi à convaincre les futurologues qu'ils tenaient là le carburant du futur. Ressource illimitée et combustion sans pollution : rien ne pourrait lui être reproché !

S'il est vrai que l'utilisation de l'hydrogène pourrait utilement contribuer au mix énergétique, il demeure un certain nombre d'écueils avant qu'il devienne un vecteur énergétique banalisé pour les transports. De grosses difficultés existent depuis sa production jusqu'à son usage, qui toutes ont trait à sa très faible den-

sité énergétique volumique par comparaison avec les carburants liquides.

Il y a tout d'abord les questions de sécurité des réservoirs qui sont très prégnantes dans le cas du stockage sous pression et qui ont fait l'objet de développements technologiques multiples, dont on peut penser qu'ils pourraient aboutir à court ou moyen terme, sous réserve d'acceptation sociale. Ce n'est en tout cas plus un verrou technique.

Une autre voie pour le stockage est la solubilisation dans des solides, lequel lève la barrière de la sécurité mais pose des problèmes fonctionnels dans le contexte des véhicules : à la fois en termes de quantité stockable et de réversibilité (cinétique de désorption). Cette question relève très fortement de la chimie et des matériaux. Différentes voies sont étudiées : par chimisorption

Figure 10

Gammes de température pour la production des biocarburants de deuxième génération.

Figure 11

Coût de production de l'hydrogène en fonction des filières de production actuelles ou potentielles.
 SMR : Steam methane reforming (reformage du méthane à la vapeur).
 EVHT = électrolyse vapeur d'eau à haute température.

(cas des hydrures) ou par physisorption sur des solides poreux, dotés de grandes surfaces spécifiques (charbons actifs, zéolithes, nanotubes de carbone, etc.).

Le stockage cryogénique est une autre manière d'augmenter la densité du stockage mais qui est très énergivore et pose également des problèmes de mise en œuvre auxquels la chimie pourrait apporter des améliorations, notamment en termes de réservoirs de stockage (isolation thermique/matériaux).

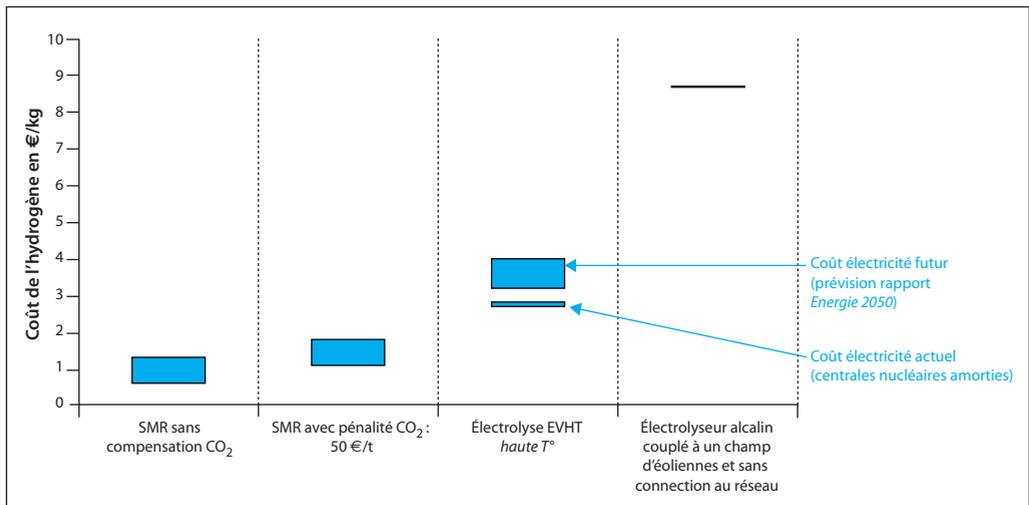
À ce jour, la production d'hydrogène est essentiellement basée sur des processus d'extraction chimique à partir de ressources fossiles : il repose ainsi de manière très majoritaire sur des procédés de raffinage (ex : vaporeformage du gaz naturel) qui offrent la voie la plus économique, par comparaison aux procédés électrolytiques (voir la Figure 11), mais qui sont émetteurs de CO_2 .

Sa production *in situ* par des procédés embarqués dans

le véhicule est une autre voie, plus « rupturiste », qui a déjà été envisagée et qui permettrait de résoudre les problèmes de sécurité liés au stockage mais dont la mise en œuvre se heurte à de nombreuses difficultés. Le principe employé repose alors sur un processus réactionnel qui libère l'hydrogène : par exemple, un processus de déshydrogénation d'un composé hydrocarboné.

2.3. Autres carburants

Pour terminer sur ces pistes, encore au stade de la R&D, qui concernent les carburants alternatifs, on se doit de citer celles visant à l'utilisation plus efficace du gaz naturel, comme le système *dual fuel* (gazole/gaz) étudié par IFPEN. Les recherches ne portent pas sur le carburant proprement dit mais concernent la technologie moteur : système de combustion, d'injection, et aussi les systèmes d'allumage pour améliorer l'initiation de la



combustion du gaz. Le principe des systèmes dual fuel consiste à générer un allumage « chimique », obtenu par injection initiale de gazole dans un cycle diesel, ce qui permet d'améliorer le rendement de combustion. De cet usage du gaz comme carburant, il résulte des émissions de fumée quasiment nulles grâce à l'homogénéité optimale du mélange air/carburant et à l'absence en son sein de précurseurs de suie (aromatiques, naphènes). En outre, le post-traitement se trouve simplifié par l'utilisation d'un catalyseur trois voies.

leur optimisation au sein d'un moteur est loin d'être atteinte. La maîtrise des multiples paramètres (de température, de pression, de concentration des constituants, d'injection), qui déterminent le cours de la réaction de combustion et qui sont extrêmement variables en fonction des conditions de fonctionnement, est une réelle difficulté (Figure 12). L'optimisation de la réaction de combustion nécessite leur maîtrise, laquelle s'appuie sur la connaissance de l'hydrodynamique des gaz au sein du moteur. Ainsi, la question de la combustion n'est pas seulement chimique, mais sollicite aussi la compréhension des phénomènes aérodynamiques lors du remplissage du moteur (turbulence, écoulement...).

Pour les moteurs diesel, cette interaction entre turbulence et chimie conditionne l'optimisation du mélange

3 La combustion (cas du moteur diesel)

3.1. Rappel du principe de fonctionnement

Si les réactions chimiques mises en jeu dans la combustion sont bien connues,

Figure 12

La combustion : résultat d'interactions entre turbulence et chimie (cas du Diesel).

- Injection du carburant liquide à très haute pression (> 2 000 bar)
- Le Diesel se casse en fines gouttelettes, s'évapore et se mélange à l'air
- Ce mélange réactif s'auto-inflamme sous l'effet de la compression par le piston
 - chaleur (travail)
 - genèse d'espèces polluantes

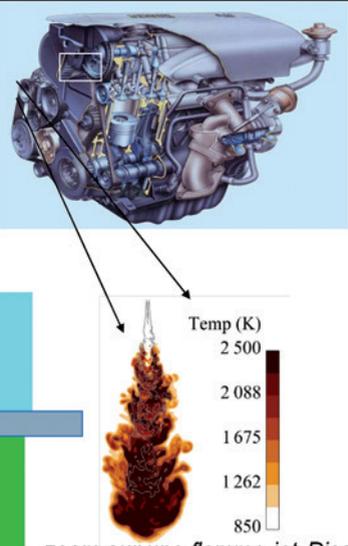
Turbulence :

- mélange les réactifs chimiques
- pilote la vitesse macro de combustion
- pertes thermiques aux parois (rendement)

+

Cinétique chimique :

- délais d'auto-inflammation
- structure micro de la combustion
- genèse et évolution des polluants (NOx, suies,...)



zoom sur une flamme-jet Diesel

des réactifs chimiques, et finalement la combustion **au plan macroscopique** – auto-inflammation, vitesse de combustion. **Au plan microscopique**, on a aussi besoin pour progresser de comprendre comment la combustion se déroule et comment elle génère les molécules parasites qui produisent les polluants – les suies, les particules et les oxydes d'azote (NOx). Cette compréhension s'appuie sur des travaux de modélisation numérique qui font le lien entre ces deux échelles.

De nombreux laboratoires (voir le **Chapitre de S. Candel**) sont actifs sur ces questions dont l'enjeu est important aussi bien pour améliorer l'efficacité énergétique (la consommation de carburant), que pour contrôler l'impact environnemental – et en définitive pour atteindre l'équilibre souhaité entre ces deux impératifs.

La modélisation tridimensionnelle, aujourd'hui accessible grâce aux puissances de calcul des ordinateurs et aux logiciels adaptés, permet de comprendre finement le fonctionnement de la chambre de combustion. Cette connaissance permet d'ajuster les paramètres avec précision pour réaliser l'équilibre souhaité entre contraintes d'ordre énergétique (consommation) et d'ordre environnemental (rejets).

Dans le cas du moteur diesel, pour lequel ce dernier critère est important, notamment pour les émissions de suies et de NOx, un mode de remédiation s'appuie sur la filtration des gaz d'échap-

pement ; cependant, cette technologie a un coût et ne favorise pas le rendement énergétique global. La modélisation ouvre une autre voie : en indiquant les conditions de formation de ces polluants, elle permet de comprendre les conditions de leur apparition et donc de déterminer celles pour lesquelles ils n'apparaissent plus – ou en tout cas, en moindre quantité. Pour les NOx, le recyclage des gaz d'échappement et la catalyse SCR (réduction catalytique sélective) permettent de contrôler ces polluants, mais là aussi, la modélisation a un apport extrêmement bénéfique.

Par ailleurs, la modélisation numérique accompagne de plus en plus les études de chimie expérimentale, et particulièrement dans le domaine de la combustion moteur, leur combinaison joue un rôle fondamental. Elle permet aux motoristes de concevoir des chambres de combustion mieux adaptées aux besoins, d'optimiser les systèmes d'injection, d'améliorer le système énergétique global du véhicule, ou même de préciser les potentialités des motorisations alternatives. Ainsi, quand on parle d'hybridation, on parle de deux vecteurs énergétiques, un vecteur électrique et un vecteur carburant liquide ou gazeux : il faut associer l'un et l'autre dans un souci d'optimisation de la gestion de l'énergie à bord et d'agrément d'utilisation. Cette optimisation est rendue possible par la modélisation de l'ensemble et par la capacité qui en résulte à

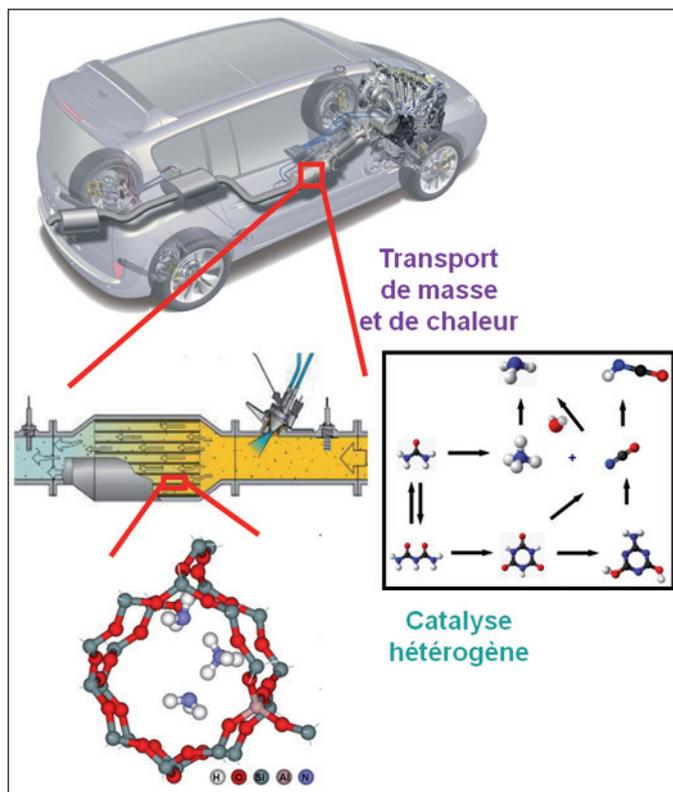


Figure 13

Traitement des polluants issus de la combustion.

choisir en continu la source à utiliser, soit seule soit en combinaison, pour atteindre la dépense énergétique et l'impact environnemental minimaux.

3.2. Traitement des polluants

Quoiqu'il en soit, malgré tous les efforts consacrés à améliorer la combustion, le problème des polluants émis demeure. L'intérêt de les éliminer reste donc un enjeu fort qui continue à stimuler des travaux de recherche dans le domaine de la catalyse (Figure 13 et Encart « Les défis pour le traitement des polluants »).

LES DÉFIS POUR LE TRAITEMENT DES POLLUANTS

Défis technologiques

- intensification du procédé : vers un catalyseur 4-voies (CO, C_xH_yO_z, NO_x, suies) ;
- diminution de la quantité de métaux précieux dans le catalyseur ;
- impact du carburant utilisé sur la réactivité des suies ;
- augmentation de la durabilité (de 100 000 à 160 000 km pour la conformité des émissions).

Solutions développées à IFPEN

- conception multi-échelles du procédé, du site catalytique à l'intégration au véhicule ;
- contrôle de l'injection du réducteur (urée) pour éviter l'encrassement de la ligne et la fuite d'ammoniac ;
- minimisation de l'empoisonnement et du vieillissement du catalyseur (SO_x, cendres...).

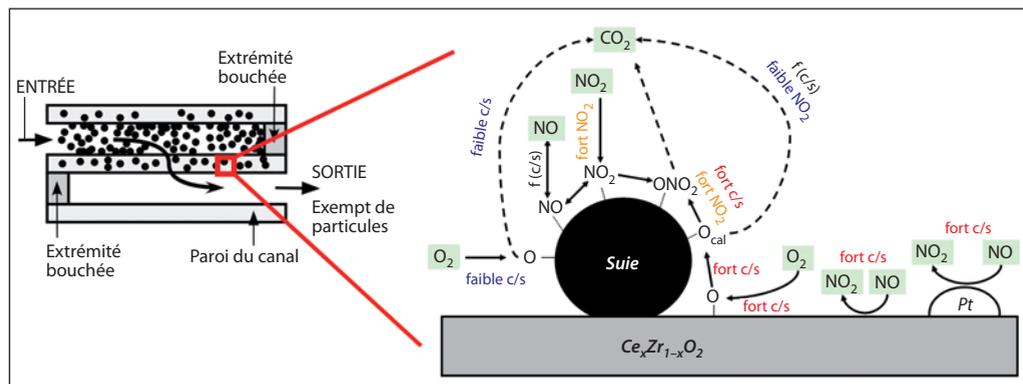


Figure 14

Mécanismes catalytiques pour le traitement des particules diesel.

Un modèle d'oxydation des suies par des mélanges $\text{NO}_x + \text{O}_2$ a été développé prenant en compte le degré de graphitisation et le rapport massique catalyseur /suie (c/s). Cela a permis de mettre en évidence la contribution de voies purement thermiques à fort rapport c/s .

En effet, la minimisation de l'impact environnemental des motorisations thermiques repose aujourd'hui majoritairement sur le post-traitement des gaz d'échappement. Or l'usage des systèmes de post-traitement est une source d'accroissement de la consommation d'énergie, en raison des pertes de charges qu'ils occasionnent. Par ailleurs, certains font l'objet de régénérations périodiques (comme les filtres à particules, les pièges à NO_x), et tous doivent garder leur efficacité dans la durée. L'amélioration sur ces différents aspects est donc nécessaire. Pour le traitement des particules de diesel, une démarche de compréhension des phénomènes a été suivie par les chercheurs d'IFPEN. Elle a consisté à développer des modèles d'oxydation des suies et à simuler l'ensemble

des contributions physico-chimiques mises en jeu à la fois à la formation de ces particules et à leur destruction (**Figure 14**).

3.3. Les émissions du puits à la roue

Un élément déterminant pour le choix des filières repose sur l'analyse des cycles de vies. Il s'agit d'une approche qui consiste à comparer une voie énergétique en termes de rejets de gaz à effet de serre évalués depuis le moment de la production de la filière énergétique jusqu'au moment où l'énergie a été récupérée sur le véhicule. La **Figure 15** illustre le positionnement des ces différentes filières en terme d'émissions de gaz à effet de serre ramené à leurs consommations énergétiques respectives, et guide quant aux progrès attendus.

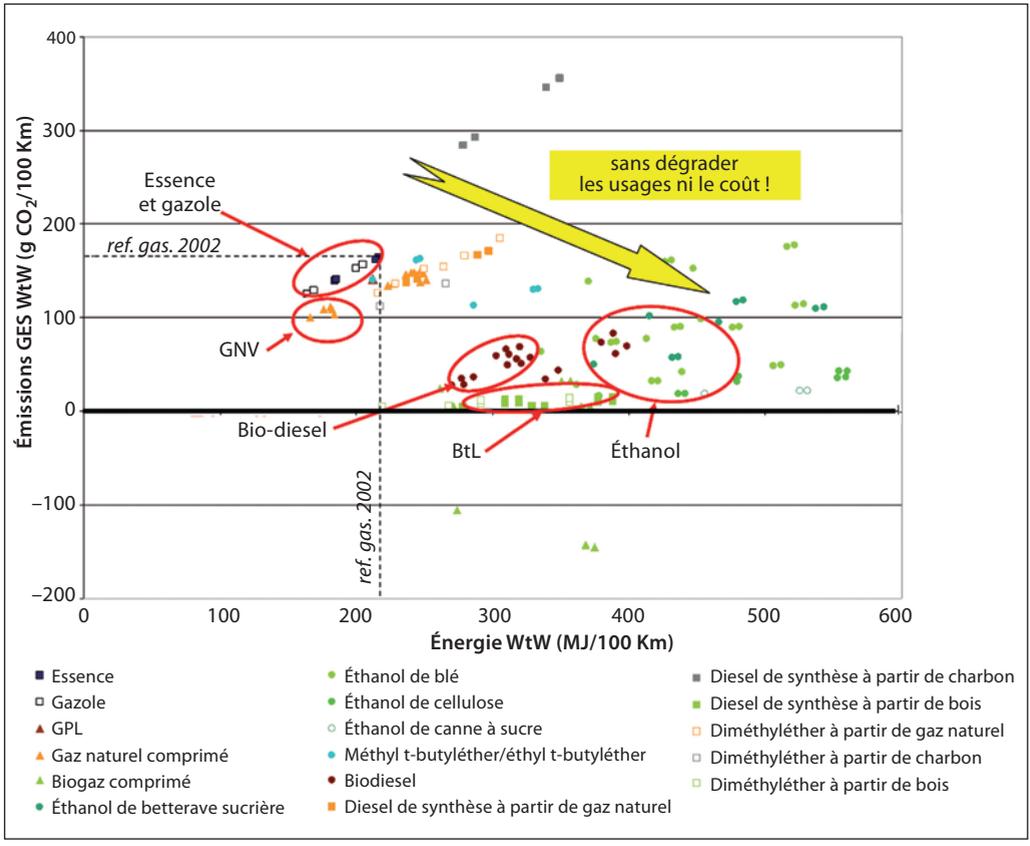


Figure 15

Performance environnementale et énergétique relative des carburants.

Les véhicules à motorisation thermique de demain : des défis à relever pour la chimie

Des travaux de recherche importants qui font la part belle à la chimie, seule ou en combinaison avec d'autres disciplines, sont nécessaires pour relever les défis scientifiques dans le domaine des véhicules à motorisation thermique, c'est-à-dire *via* la combustion de carburants liquides ou gazeux.

Les besoins qu'ils visent à satisfaire en termes de performance énergétique ou environnementale seront de plus en plus contraignants, dans la mesure où le moteur thermique restera pendant encore de nombreuses années le mode privilégié pour la propulsion des véhicules terrestres (et aéronautiques). Cette tendance qui paraît inéluctable ressort essentiellement de la demande croissante de mobilité individuelle des pays émergents – malgré la tendance escomptée des pays occidentaux à s'orienter vers des alternatives à dominante électrique.

En résumé, les objectifs de progrès pour l'amélioration énergétique des véhicules sont les suivants :

- viser des **carburants à impact CO₂ minimisé**, en s'orientant vers des biocarburants qui permettent de tendre vers la neutralité carbone ;
- continuer à développer de nouveaux carburants – **carburants alternatifs diversifiés** ou traditionnels – et des modes de combustion adaptés pour optimiser leur usage ;
- pour les carburants conventionnels, il faut poursuivre l'**amélioration de la combustion** dans les moteurs ; mieux comprendre et mieux modéliser les phénomènes qui ont lieu à l'intérieur des chambres de combustion pour améliorer l'adéquation du carburant au moteur et améliorer leur rendement de combustion (c'est-à-dire leur taux de transformation), et par la même occasion minimiser les rejets ;
- enfin, **améliorer le post-traitement** qui reste un enjeu fort, en particulier pour le moteur diesel, notamment sur la question des particules et des oxydes d'azote.

Pour les chercheurs, l'espace est très ouvert. De nombreux travaux de recherche et voies de développement sont aujourd'hui possibles dans le domaine des carburants pour la propulsion

des véhicules, qu'ils soient conventionnels avancés ou alternatifs. Le contexte actuel et à venir conduira à la diversification des modes de propulsion et des sources d'énergie mais il reste beaucoup à faire pour améliorer les solutions dites conventionnelles. Dans tous les cas, **la palette des améliorations possibles est large**, en combinant le recours aux sciences dures, dont en grande partie la chimie, avec un autre ingrédient tout aussi accessible aux jeunes diplômés, à savoir la créativité.

