



Rédigé le 21 février 2019



5 minutes de lecture



Actualités

Recherche fondamentale

Climat, environnement et économie circulaire

Captage, stockage et valorisation du CO₂

Sciences physiques

Thermodynamique / Modélisation moléculaire

Pour limiter le réchauffement climatique et respecter les engagements pris au niveau de l'Accord de Paris (COP21), la réduction des émissions des gaz à effet de serre anthropogéniques est un enjeu majeur.

Pour y parvenir, la voie du **CCS** (*Carbon Capture and Storage*), consistant à stocker le CO₂ dans le sous-sol, est étudiée depuis plusieurs années et on voit également apparaître des voies telles que le **CCU** (*Carbon Capture and Utilization*) qui confère à l'opération une plus-value économique. Dans tous les cas, il importe de **bien connaître les propriétés du mélange gazeux considéré, de manière à anticiper ses interactions** avec les milieux au contact desquels il pourra se trouver par la suite.

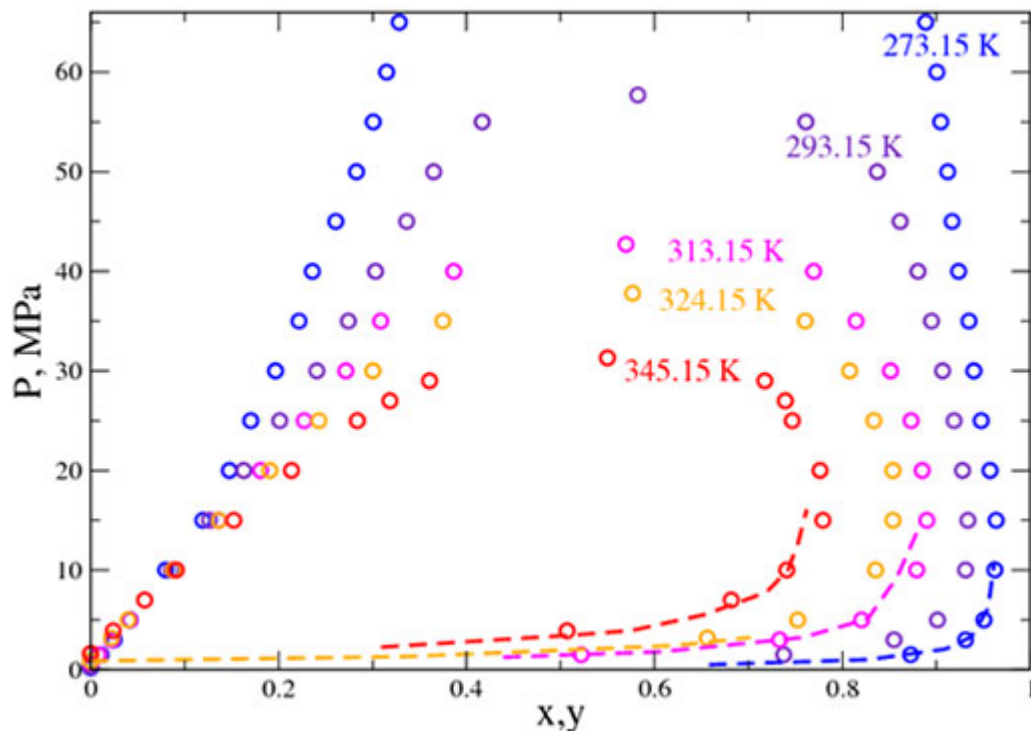
Pour le stockage du CO₂ dans différentes couches du sous-sol, IFPEN s'est impliqué dans les projets ANR **Gaz Annexes** et, plus récemment, **SIGARRR** (Simulations de l'impact des gaz annexes sur la réactivité des roches-réservoirs). Ces deux projets étaient dédiés à l'étude par voies expérimentales et numériques de la phase de séquestration géologique, dans une logique de sécurité (étanchéité du stockage). Dans la mesure où le gaz injecté contient des impuretés (NO_x, SO_x, H₂S, N₂, O₂, etc.), ils visaient en particulier à **déterminer l'impact de celles-ci sur les propriétés physiques de ce gaz ou encore sur sa réactivité avec l'eau et/ou les minéraux**

constituant les roches réservoirs et de couverture.

Classiquement, les simulations numériques requises par ce type d'études, mettent en œuvre de la modélisation géochimique laquelle repose sur des lois thermodynamiques empiriques (modèles d'activité, équations d'état, etc.) dont les paramètres sont calés au moyen de données expérimentales. Or dans certains cas, en fonction des caractéristiques des composés considérés (toxicité, stabilité, etc.) et des conditions de température et de pression ciblées, l'acquisition de nouvelles données expérimentales peut s'avérer être extrêmement coûteuse, dangereuse voire même impossible.

Ces dernières années, en phase avec les orientations prises dans le domaine de la digitalisation, **IFPEN a développé et utilisé diverses techniques de simulations moléculaires** dans le but de générer des **données dites «pseudo-expérimentales»**, pour des conditions opératoires difficilement atteignables par voie expérimentale [1-4].

Ces travaux ont été couronnés de succès puisqu'un excellent accord entre les données expérimentales disponibles et les données "pseudo-expérimentales" a été obtenu. La qualité de ces prédictions numériques concerne aussi bien des propriétés (viscosité, masse volumique) que des diagrammes d'équilibre de phase (pression-composition comme présenté sur la figure ci-dessous). Nul recalage sur des données expérimentales n'est requis puisque les calculs sont intrinsèquement prédictifs. Il s'agit donc là d'un moyen commode de générer des données, en particulier celles servant à optimiser les paramètres des équations d'état qui alimentent les modèles géochimiques.



Exemple de diagrammes pression-composition générés à l'aide de la simulation moléculaire, pour un système binaire dioxyde de soufre / monoxyde d'azote.

L'axe des abscisses représente la fraction en monoxyde d'azote. Les lignes en tiret représentent les quelques données expérimentales de référence disponibles.

Publications

1. Creton, B.; [Lachet, V.](#) ***Thermodynamic study of binary systems containing carbon dioxide and associated gases using molecular simulation techniques.*** Energy Research Network Conferences & Meetings, 2018. Présentation au [Congrès GHGT14](#).
>> <https://ssrn.com/abstract=3365730> ?
2. Creton, B.; [Nieto-Draghi, C.](#); de Bruin, T.; [Lachet, V.](#); El Ahmar, E.; Valtz, A.; Coquelet, C.; Lasala, S.; Privat, R.; Jaubert, J.-N. ***Thermodynamic study of binary systems containing sulphur dioxide and nitric oxide: measurements and modeling.*** Fluid Phase Equilibria, 2018, Vol. 461, p. 84-100.
>> DOI: [10.1016/j.fluid.2017.12.036](https://doi.org/10.1016/j.fluid.2017.12.036)
3. Creton, B.; de Bruin, T.; Le Roux, D.; Duchet-Suchaux, P.; [Lachet, V.](#) ***Impact of associated gases on equilibrium and transport properties of a CO₂ stream: Molecular simulation and experimental studies.*** International Journal of Thermophysics, 2014, Vol. 35, p. 256-276.
>> DOI: [10.1007/s10765-014-1592-6](https://doi.org/10.1007/s10765-014-1592-6)
4. [Lachet, V.](#); Creton, B.; de Bruin, T.; Bourasseau, E.; Desbiens, N.; Wilhelmsen, Ø.; Hammer, M. ***Equilibrium and transport properties of CO₂+N₂O and CO₂+NO mixtures: Molecular simulation and equation of state modelling study.*** Fluid Phase Equilibria, 2012, Vol. 322-323, p. 66-78.
>> DOI: [10.1016/j.fluid.2012.03.011](https://doi.org/10.1016/j.fluid.2012.03.011)

Simulation moléculaire et stockage du CO₂
21 février 2019

Lien vers la page web :