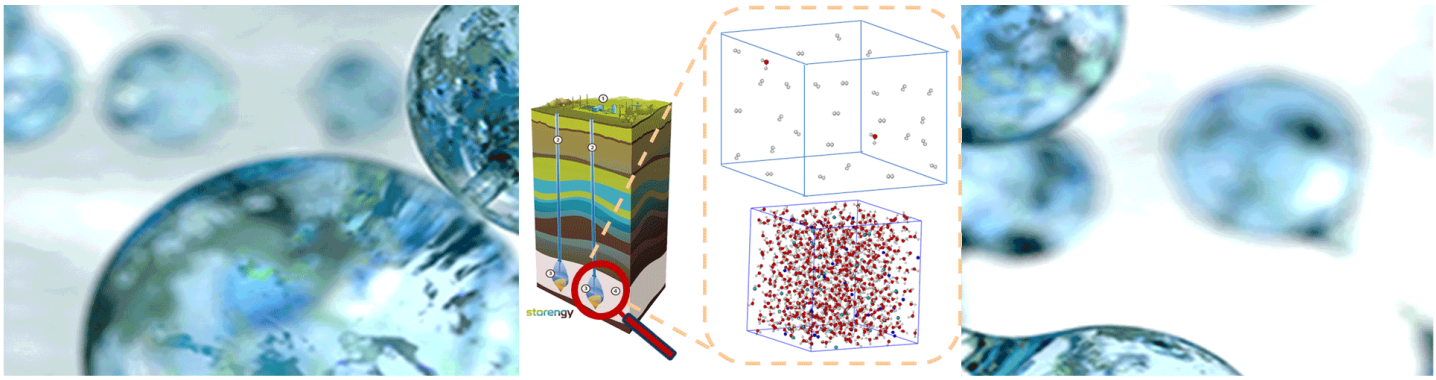


Rédigé le 05 février 2020

5 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Énergies renouvelables | Hydrogène | Stockage d'énergie

Sciences physiques | Thermodynamique / Modélisation moléculaire

Depuis plusieurs années, IFPEN développe une méthodologie visant à mieux comprendre les phénomènes physico-chimiques et à caler des lois thermodynamiques empiriques à partir de calculs *in silico* basés sur une approche de simulation moléculaire. Cette méthodologie vient d'être appliquée à une thématique NTE* : le stockage géologique de l'hydrogène.

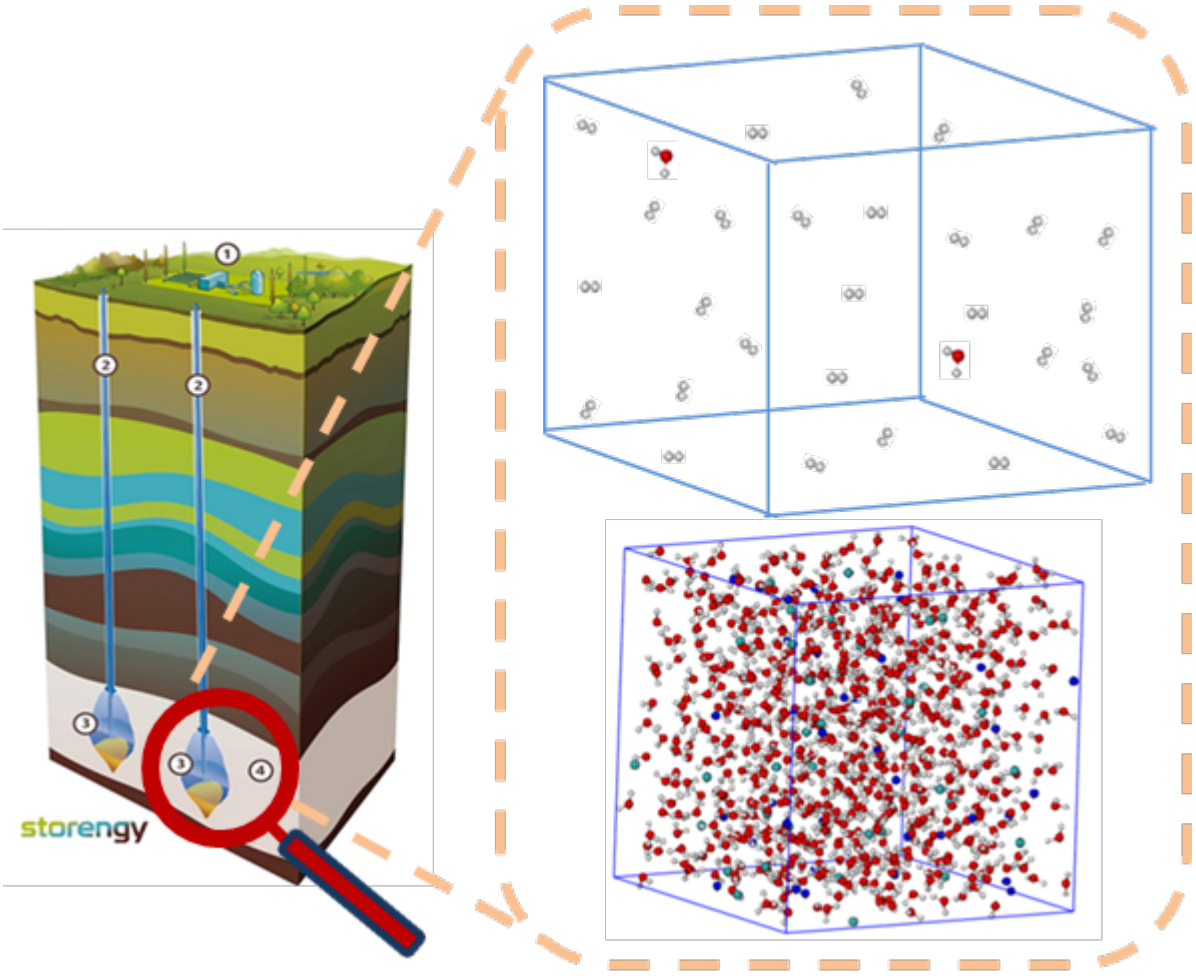
Stocker l'hydrogène dans les sous-sols : un enjeu de la transition énergétique

L'hydrogène (H_2) est amené à occuper, dans les prochaines années, une place de plus en plus importante dans le mix énergétique. Produit par électrolyse à partir de sources renouvelables, il constitue un vecteur d'énergie de premier intérêt pour soutenir la transition énergétique. Par ailleurs, son injection dans le sous-sol s'avère être une solution efficace pour son stockage à grande échelle et sur le long terme.

Dans ce contexte, des modèles sont nécessaires pour mieux appréhender le comportement de l'hydrogène dans les formations géologiques. Sa solubilité dans les saumures en particulier constitue un paramètre clé qui influence directement sa réactivité et sa mobilité dans les milieux poreux.

La simulation moléculaire en renfort des expérimentations classiques

Le manque de données expérimentales d'équilibre de phase entre l'hydrogène et l'eau salée, dans des conditions thermodynamiques représentatives du sous-sol, limite significativement le développement de tels modèles. La très faible solubilité et la dangerosité de ce gaz rend par ailleurs difficile et coûteuse l'acquisition de nouvelles données. Une alternative consiste donc à compléter les expérimentations classiques par des calculs de simulation moléculaire avec la méthode Monte Carlo, particulièrement bien adaptée à la prédiction d'équilibres de phase.



Principe de la méthodologie : l'équilibre de phase se produisant au sein d'un stockage géologique est déterminé à travers des simulations moléculaires de type Monte Carlo. Les données d'équilibre générées peuvent alors être utilisées pour calibrer des lois empiriques utilisées par les opérateurs

Générer des données d'équilibre pour les opérations de calibrage

Parce qu'elle s'appuie sur une base physique rigoureuse, la simulation moléculaire permet de prédire avec une bonne précision les grandeurs thermodynamiques recherchées. La méthodologie (voir encadré) peut s'apparenter à de l'expérimentation *in silico*. Dans un premier temps, un champ de forces (ensemble des équations décrivant les interactions entre molécules) est paramétré et validé sur

les données expérimentales existantes. L'aspect prédictif de la méthode est exploité dans un deuxième temps pour simuler le système dans des conditions extrapolées de température, pression et salinité qui sont celles typiquement rencontrées lors des opérations de stockage. Les données *in silico* ainsi générées peuvent ensuite être utilisées pour calibrer les lois thermodynamiques utilisées par les opérateurs.

Cette méthode, qui a donné lieu à deux publications, a été réalisée en partenariat avec Engie puis Storengy : après avoir servi à la validation des calculs de simulation moléculaire, les données de températures et de salinité obtenues par expérimentation ont été extrapolées à des niveaux plus élevés et plus représentatifs du stockage géologique. Les résultats ont permis de calibrer finement une équation d'état électrolyte (e-PPC-SAFT) que Storengy a utilisée pour évaluer l'impact de plusieurs cycles d'injection-soutirage d'hydrogène sur la performance du stockage et la qualité du gaz produit dans une cavité saline fictive.

*Nouvelles technologies de l'énergie

Contacts scientifiques : **Nicolas Ferrando, pierre.bachaud@ifpen.fr**

Références :

- Lopez-Lazaro, C. ; Bachaud, P. ; Moretti, I. ; Ferrando, N. Predicting the phase behavior of hydrogen in NaCl brines by molecular simulation for geological applications. BSGF-Earth Sciences Bulletin 2019, 190, 7.

- Roa Pinto, J. C.; Bachaud, P.; Fargetton, T.; Ferrando, N.; Jeannin, L.; Louvet F. *Modeling phase equilibrium of hydrogen and natural gas in salt caverns*. En préparation.

> En savoir plus sur l'expertise hydrogène d'IFPEN

La simulation moléculaire au service du stockage géologique de l'hydrogène
05 février 2020

Lien vers la page web :