

## Sujet de postdoctorat (1 an)

### Modélisation de réactions thermiques dans les réservoirs souterrains dans le cadre de stockage de gaz acides et à effet de serre

**Description du projet :** Utiliser les réservoirs d'hydrocarbures en fin d'exploitation comme lieux de stockage de gaz acides, comme  $H_2S$  ou  $CO_2$ , est une alternative de plus en plus envisagée. Ce stockage pourrait conduire d'ici à 2050 à une réduction de 20% des émissions industrielles mondiales de gaz à effet de serre. Cependant, ces réservoirs souterrains contiennent encore 50 à 70 % de leurs hydrocarbures, trop coûteux ou trop difficiles à exploiter. Dans des études précédentes, nous avons montré que d'une part,  $H_2S$  n'est pas inerte vis-à-vis des hydrocarbures, mais conduit à leur craquage thermique et à la production, notamment, de  $H_2$  qui peut être explosif. D'autre part, le  $CO_2$  capté à l'issue de combustions contient diverses impuretés et en particulier de l'oxygène résiduel. Nous avons montré précédemment que ce  $CO_2$  impur n'était pas inerte en présence d'hydrocarbures, mais pouvait conduire à des réactions d'oxydation voire des explosions. Des risques se posent donc quant à la stabilité du stockage, mais également en cas de soutirage du gaz, la législation imposant la réversibilité.

Deux approches antagonistes sont actuellement développées : la modélisation cinétique détaillée des réactions dans des réacteurs idéaux, ou la modélisation détaillée des réservoirs (modèles thermiques et de transport en milieu poreux) mais avec une réactivité simpliste et non réaliste. Afin de contribuer à lever la dichotomie entre ces deux approches et de coupler les modèles de transport de matière et de transfert de chaleur avec une chimie détaillée, des logiciels tels que Energico (ANSYS®), permettent de proposer, à partir d'une simulation de Mécanique des Fluides Numérique (CFD) par un logiciel commercial, des modèles compartimentaux de réacteurs sous la forme d'un réseau de réacteurs équivalents. Cette approche consiste à découper le milieu en compartiments, zones fonctionnelles localisées dans l'espace, de les caractériser et de les modéliser. L'avantage est d'alléger les besoins en puissance informatique nécessaire à la simulation de l'écoulement, pour mieux prendre en compte la complexité de la chimie. Après avoir validé le modèle compartimental du « réacteur » permettant de modéliser l'écoulement au sein du réservoir, il est alors possible d'y coupler un modèle cinétique détaillé que l'on simulera via le logiciel CHEMKIN PRO (ANSYS®).

Le but de ce projet est donc d'adapter les logiciels Energico et CHEMKIN PRO à la modélisation des réactions thermiques des hydrocarbures dans les conditions de réservoirs, et de déterminer un modèle compartimental équivalent à un réservoir en termes de transport et de transfert thermique, sur la base de résultats obtenus par des logiciels de CFD commerciaux. Enfin, il sera étudié les conséquences d'une injection de gaz acides sur un réservoirs d'hydrocarbures en fin d'exploitation.

**Qualifications :** Les candidats seront titulaires d'un doctorat en Génie des Procédés, en Energie et Mécanique, en Sciences des Matériaux ou autres domaines proches, soutenu après 2015 et avant 2019. Des compétences en simulation, développement numérique, logiciels scientifiques (ex : Matlab) et langage de programmation (ex : Fortran) sont indispensables. De bonnes compétences en communication orale et écrite sont également requises.

**Rémunération :** La durée du contrat est d'un an et ne démarrera pas plus tard que le 15/07/2019. Le salaire brut est de l'ordre de 2600 euros.

**Contacts :** Les candidats contacteront Roda Bounaceur (Ingénieur de Recherche au CNRS ; [roda.bounaceur@univ-lorraine.fr](mailto:roda.bounaceur@univ-lorraine.fr)) et Valérie Vitzthum (Maître de Conférences à l'Université de Lorraine ; [valerie.vitzthum@univ-lorraine.fr](mailto:valerie.vitzthum@univ-lorraine.fr)) et fourniront un CV détaillé ainsi que leur liste de publications.

**Laboratoire et contexte :** Le travail sera réalisé au sein de l'axe « Cinétique, Thermodynamique et Energie » du Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (<http://lrgp-nancy.cnrs.fr>) de Nancy. Le projet est financé par l'ICEEL (Institut Carnot pour l'Energie et l'Environnement en Lorraine) et la Région Grand Est.

## Postdoctoral position (1 year)

### Modelling of thermal reactions in depleted hydrocarbon reservoirs in the context of acid and greenhouse gas storage

**Project description:** H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub> capture and storage in depleted hydrocarbon reservoirs (gas or oil) seems to be a good solution to reduce acid and greenhouse gas emissions. It could reduce from about 20% the worldwide gas emissions in 2050. Nevertheless, depleted reservoirs still contain from 50 to 70% of hydrocarbons, which are too difficult or too expensive to be extracted. In previous studies we demonstrated that H<sub>2</sub>S reacts with hydrocarbons, yielding in particular H<sub>2</sub> which can become explosive. Moreover, CO<sub>2</sub> may contain impurities, especially residual O<sub>2</sub> after industrial combustion. We also showed that this impurity leads to the oxidation of hydrocarbons inside the reservoir, even explosions. So some questions arise concerning the stability of gas storage in depleted reservoirs, as well as in case of withdrawal, and the risks must be assessed.

Two antagonistic approaches are currently being developed. The first is the detailed kinetic modelling of the thermal reactions in ideal reactors, and the second one is the detailed modelling of the reservoirs (thermal modelling and modelling of transport in porous media), but with a very simple and non realistic kinetic model of the reactions.

In order to couple detailed kinetic models and realistic models of transport and thermal transfer in reservoirs, softwares as Energico (ANSYS®) allows determining an Equivalent Reactors Network (ERN) of the reservoir, which is based on CFD (Computational Fluid Dynamics) simulations performed by CFD softwares, such as FLUENT, COMSOL and so on. It consists in slicing the reservoir into functional cells, and then characterizing and modelling them. The benefit would be to reduce the need for computer power necessary for the simulation of the flow, in order to better take into account the complexity of the chemistry. After validating the ERN of the reservoir, it would be possible to simulate a detailed kinetic model of thermal reactions by the software CHEMKIN PRO (ANSYS®). The final objective is to couple a detailed kinetic model with a transport model through the ERN approach and a thermal transfer model.

**Qualifications:** The candidates must have a PhD in Process Engineering, Energy and Mechanics, Materials Science, or other close fields, defended after 2015 and before 2019. Knowledge in simulation, numerical development, scientific softwares (as Matlab) and programming languages (as Fortran) is required. Good oral and written communication skills are also required.

**Appointment:** The appointment period is for one year, starting not after 15/07/2019. Gross salary is about 2600 euros.

**Application:** Prospective candidates should contact Dr Roda Bounaceur (Research engineer at CNRS ; [roda.bounaceur@univ-lorraine.fr](mailto:roda.bounaceur@univ-lorraine.fr)) and Dr Valérie Vitzthum (Associate Professor at the University of Lorraine ; [valerie.vitzthum@univ-lorraine.fr](mailto:valerie.vitzthum@univ-lorraine.fr)) and need to provide a detailed CV, including a list of publications.

**Laboratory and context:** The research will be performed in the Kinetics, Thermodynamics and Energy group of the Laboratory of Reactions and Process Engineering (<http://lrgp-nancy.cnrs.fr>) in Nancy. The project is funded by ICEEL and the Region Grand Est.