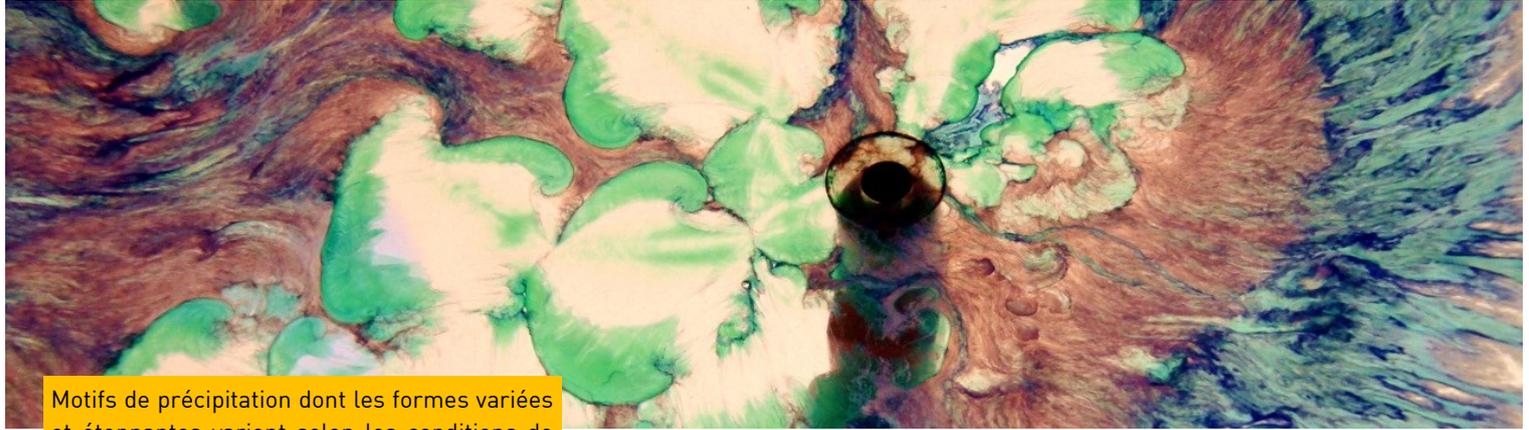


LA CHIMIE AU SERVICE DE L'ENVIRONNEMENT

EXPLOITER LA RÉACTIVITÉ DES ESPÈCES CHIMIQUES POUR CONTRÔLER LEUR DISTRIBUTION DANS LES SOUS-SOLS



Motifs de précipitation dont les formes variées et étonnantes varient selon les conditions de concentrations et de transport.

Anne De Wit-Laurence Rongy

1 RÉACTIONS CHIMIQUES ET TRANSPORT DANS LES SOUS-SOLS

Améliorer l'exploitation des ressources énergétiques fossiles, assainir une zone de pollution ou stocker des gaz à effet de serre dans les sous-sols : autant de problématiques industrielles et environnementales majeures auxquelles la chimie peut amener des solutions.

En effet, les réactions modifient la composition du milieu et peuvent ainsi être exploitées à dessein pour combattre la pollution de sous-sols ou optimiser l'extraction d'hydro-

carbures et la séquestration de CO_2 .

Comprendre les conditions chimiques optimales qui permettent un contrôle des écoulements souterrains et une gestion durable des sous-sols reste cependant un défi important à relever à cause de la complexité des modèles impliqués et de la difficulté de mener des expériences contrôlées *in situ*.

L'INJECTION DE CO_2 DANS LES SOUS-SOLS EST UNE DES SOLUTIONS PROPOSÉES POUR SÉQUESTER CE GAZ À EFFET DE SERRE ET AINSI LIMITER L'AUGMENTATION DE SA CONCENTRATION ATMOSPHÉRIQUE.



Anne De Wit

Faculté des Sciences, ULB

Docteur en Sciences (Chimie) et Agrégée de l'Enseignement Supérieur de l'ULB. Post-doctorat à l'Université de Stanford (USA). Professeur ordinaire, directrice de l'Unité de Chimie Physique Non Linéaire et co-directrice du Service de Chimie Physique et Biologie Théorique de l'ULB. Auteur de plus de 120 publications, dirige une équipe d'une dizaine de chercheurs. Fellow de l'American Physical Society (2015), Prix Agathon de Potter (2012), Chair Gordon Conference (2008), Solvay Award (1995), Prix Jean Stas (1993).

Laurence Rongy

Faculté des Sciences, ULB

Docteur en Sciences (Chimie) de l'ULB. Post-doctorat à l'Université de Harvard et à l'Université de Yale (USA). Chargée de cours à l'ULB, a obtenu une ARC Consolidator et un Mandat d'Impulsion Scientifique du F.R.S.-FNRS en 2015. Chair Gordon Seminar (2014), Prix Frédéric Swarts (2012), Solvay Awards (2009 et 2005), Prix de la Société Royale de Chimie (2004) et Prix Fleurice Mercier (2001).

2 CONTRÔLE CHIMIQUE DE LA SÉQUESTRATION GÉOLOGIQUE DU CO₂

Combattre le réchauffement climatique est une des préoccupations les plus importantes de notre époque.

Dans ce cadre, l'injection de CO₂ dans les sous-sols est une des solutions proposées pour séquestrer ce gaz à effet de serre et ainsi limiter l'augmentation de sa concentration atmosphérique.

Avant de généraliser un tel procédé, il faut analyser les risques que cela comporte, l'efficacité du procédé et l'avenir à long terme du CO₂ emprisonné dans les sous-sols.

Ces aspects requièrent une compréhension détaillée des dynamiques physico-chimiques et du transport d'espèces chimiques dans les sols.

Nos recherches visent à relever ces défis environnementaux cruciaux grâce à une combinaison d'approches expérimentales en laboratoire et théoriques sur ordinateur.

Notre objectif est d'analyser, grâce à ces approches combinées, l'impact de réactions sur la distribution de composés chimiques dans les sols afin de proposer, entre autres, des stratégies de contrôle de la séquestration géologique du CO₂ selon les trois axes de recherche présentés ci-dessous (Fig.1).

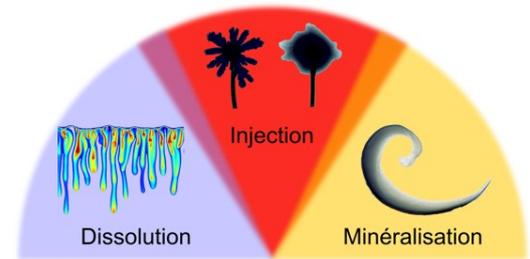
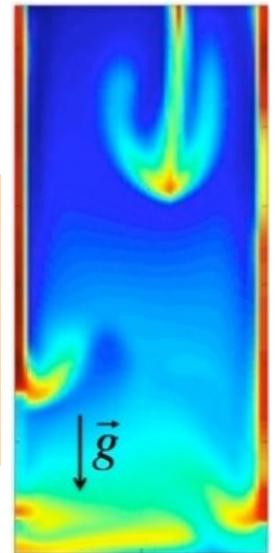


Fig.1. Contrôle chimique de la séquestration géologique du dioxyde de carbone : les réactions chimiques peuvent modifier les dynamiques de transport et ainsi permettre de contrôler la distribution des espèces chimiques dans les sous-sols. Ce contrôle peut se faire lors de l'injection, de la dissolution convective ou de la minéralisation du CO₂.

Fig.2. Simulation de la dissolution convective de dioxyde de carbone dans un hydrocarbure liquide à haute pression (40 bar). Les zones rouges sont concentrées en CO₂ et les zones bleues en hydrocarbure. Le CO₂ augmente la densité de l'hydrocarbure en s'y dissolvant ce qui donne lieu à des « doigts » plus denses coulant dans le champ de gravité.



3 INJECTION DE CO₂ DANS LES GISEMENTS D'HYDROCARBURES

L'injection de CO₂ dans les gisements d'hydrocarbures est une technique prometteuse, déjà effective à l'échelle industrielle. Elle permet de stocker le CO₂ tout en contribuant à la récupération de pétrole.

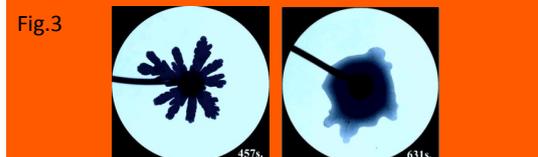
La solubilité du CO₂ dans les hydrocarbures peut être relativement élevée en fonction des conditions de pression et de température du gisement considéré. La plupart des modèles actuels décrivant ces procédés négligent cependant les interactions entre les molécules de CO₂ et du liquide souterrain.

Les modèles que nous développons ont la particularité d'incorporer ces "non idéalités" dues aux interactions, importantes dans les sous-sols à haute pression (Fig.2).

L'objectif est d'améliorer le choix des sites optimaux pour la stabilité du processus de séquestration. Par ailleurs, lors de l'injection d'eau ou de CO₂ dans les hydrocarbures visqueux, une instabilité hydrodynamique dite de digitation visqueuse peut se produire à cause d'une différence de mobilité entre les deux fluides. Le fluide injecté étant moins visqueux et donc plus mobile s'encastre dans la nappe de pétrole peu mobile en déformant l'interface entre les

deux fluides sous forme de doigts.

Ceci augmente la zone de mélange entre les composés et réduit l'efficacité de la récupération du pétrole. Notre objectif est de comprendre comment des réactions chimiques *in situ* peuvent modifier localement la viscosité à l'interface entre les deux fluides et ainsi réduire les effets néfastes de la digitation (Fig. 3).



Comparaison expérimentale entre un déplacement d'une solution visqueuse de polymères par de l'eau présentant de la digitation (à gauche) et son équivalent réactif, stabilisé par une réaction modifiant la viscosité *in situ* (à droite).

4 DISSOLUTION DU CO₂ DANS LES AQUIFÈRES SALINS

Bien répartis sur la surface du globe terrestre, les nappes aquifères dont l'eau est trop salée pour être potable se révèlent également prometteuses pour le stockage du CO₂.

Lorsque le CO₂ se dissout dans l'eau, il augmente la densité de la solution, donnant naissance à des instabilités convectives : le fluide plus dense enrichi en CO₂ coule dans l'eau (Fig.4).

Ces mouvements convectifs accélèrent le mélange du CO₂ avec l'eau et réduisent les risques de fuite.

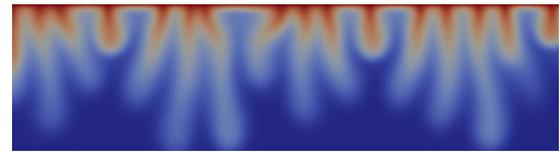
Le CO₂ dissout peut également réagir avec la roche poreuse ou avec les espèces chimiques dissoutes dans l'eau (Fig.5).

Cependant, ces effets restent largement incompris. Notre recherche se concentre sur la compréhension de l'effet de réactions chimiques sur cette dissolution convective afin d'optimiser le choix de sites de séquestration.

Fig.5: Simulation numérique de dissolution convective du CO₂ dans de l'eau contenant un réactif. La présence d'une réaction chimique peut modifier les caractéristiques de l'instabilité, rendant le système plus ou moins instable en fonction des réactifs utilisés.



Fig.4: Etude expérimentale de dissolution convective de CO₂ gazeux dans l'eau. L'interface gaz-liquide correspond à la ligne sombre horizontale. Le CO₂ dissout augmente la densité de l'eau, ce qui génère des doigts de solution plus dense contenant du CO₂ qui coulent dans l'eau.



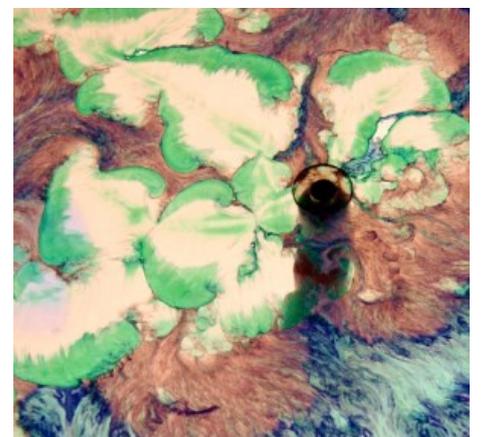
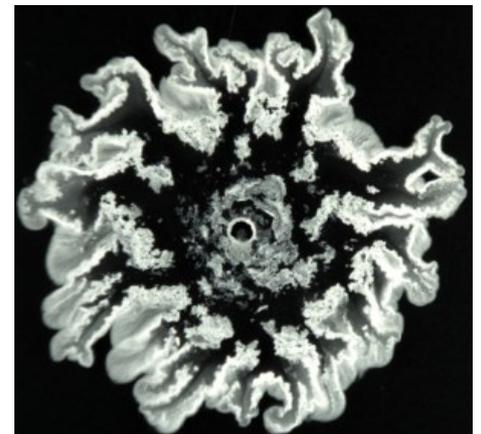
5 MINÉRALISATION DU CO₂

Un objectif majeur de la séquestration du CO₂ est la minéralisation, c'est-à-dire la transformation de ce gaz nocif en minéraux inoffensifs grâce à des réactions de précipitation.

Par exemple, le CO₂ dissout dans l'eau forme entre autres des ions carbonates qui peuvent réagir avec diverses espèces présentes dans les aquifères, telles des ions calcium (Ca²⁺) pour former du carbonate de calcium.

Ce dernier se retrouve abondamment dans les couches géologiques naturelles comme par exemple dans les couches calcaires. Grâce à des expériences modèles en laboratoire (Figure 6), nous essayons de définir les conditions optimales, dans des flux, de minéralisation du CO₂ ou d'autres composés en fonction des concentrations et de la vitesse d'injection.

Fig.6 : Précipitation de carbonate de calcium (image du haut) par injection radiale d'une solution de carbonate dans une solution contenant des ions Ca²⁺. Image du bas: Cristallisation dans un flux lors de l'injection d'une solution de chlorure de cobalt dans une solution alcaline de silicates. Les motifs de précipité obtenus et les conditions optimales de minéralisation dépendent des concentrations des deux solutions et de la vitesse d'injection.



Les recherches du Pr. Anne De Wit et du Dr. Laurence Rongy sont notamment soutenues par:

6 UNITÉ DE CHIMIE PHYSIQUE NON LINÉAIRE (NLPC), FACULTÉ DES SCIENCES, ULB.

L'Unité de Chimie Physique Non Linéaire de la Faculté des Sciences de l'ULB regroupe une quinzaine de chercheurs dont l'objectif est d'étudier la dynamique de composés chimiques dans des systèmes hors d'équilibre.

En développant des méthodes d'analyse théorique des systèmes non linéaires soutenues par des expériences, le groupe a développé une expertise mondialement reconnue dans l'étude des motifs spatio-temporels résultant de l'interaction de réactions chimiques avec des phénomènes de

transport (diffusion, convection), transitions de phase ou non idéalités.

Ce projet multidisciplinaire se développe à l'interface entre Chimie, Physique, Ingénierie et Sciences de l'Environnement au cœur de nombreuses collaborations internationales notamment dans le cadre de l'Agence Spatiale Européenne (ESA).

Les recherches sont subventionnées par le F.R.S.-FNRS, Prodex, Belspo, deux ARC (CONVINCE et PIONEER), un MIS ainsi que l'ESA.

Le groupe est composé à la fois d'expérimentateurs et de théoriciens et rassemble des chercheurs de formation complémentaire (chimistes, physiciens, mathématiciens, géologues).



L'Unité de Chimie physique non linéaire de l'ULB

7 BUDGET REQUIS SUR 4 ANS

RESSOURCES HUMAINES

Afin de relever les défis environnementaux exposés ci-dessus, il est important de pouvoir développer des études théoriques et expérimentales complémentaires de la même problématique. Il faut aussi pouvoir pérenniser la transmission de savoir lorsque des doctorants et post-doctorants terminent leur mandat.

Nous aimerions pouvoir engager un post-doctorant ainsi que 2 doctorants qui mèneraient leurs recherches expérimentale et théorique en parallèle.

EQUIPEMENT

Notre laboratoire dispose de réacteurs et d'équipement optique permettant la visualisation des dynamiques spatio-temporelles résultant de l'interaction entre réactions chimiques et phénomènes de transport.

La modélisation de ces dynamiques repose sur des ordinateurs puissants supportant la réalisation de simulations numériques sur plusieurs processeurs simultanément. Nous envisageons l'achat de nouveaux matériels expérimental et informatique.

FRAIS DE FONCTIONNEMENT

Maintenir l'équipement, remplacer les consommables du laboratoire et assurer la diffusion de nos résultats lors de conférences internationales et par le biais de publications.

RESSOURCES HUMAINES

1 Post-doc (4 ans)	200.000 €
2 Doctorats	300.000 €

EQUIPEMENT

Microscope	20.000 €
Caméras haute résolution	15.000 €
Réacteurs et pompes	15.000 €
Ordinateurs multiprocesseurs et logiciels	50.000 €

SEJOURS SCIENTIFIQUES ET FONCTIONNEMENT (4 ans)

Conférences et échanges scientifiques	50.000 €
Petit matériel optique	35.000 €
Réactifs et matériel de laboratoire	35.000 €

TOTAL	720.000 €
--------------	------------------



Pour plus d'informations : Fondation ULB - Fondation d'utilité publique - Av. F. D. Roosevelt, 50, CP 129 - B - 1050 Bruxelles
tél + 32 (0)2 650 22 94 - fondation@ulb.ac.be - www.fondation.ulb.ac.be - IBAN BE95 3630 4292 4358 BIC: BBRUBEBB

Les dons sont déductibles fiscalement à partir de 40€/an - La Fondation peut également recevoir des legs à taux réduits.