

Éditorial

APPLICATIONS DE LA THERMODYNAMIQUE DANS L'INDUSTRIE PÉTROLIÈRE

Entre les années 1761-1764, où Joseph Black découvre le phénomène de la chaleur latente, puis mesure la chaleur latente de la vapeur d'eau, et 1876, année où Josiah Gibbs commence ses travaux sur l'équilibre des phases et l'énergie libre comme force d'entraînement des réactions chimiques, les fondements de la thermodynamique auront été posés.

Cependant, en 1872, Ludwig Boltzmann énonce l'équation portant désormais son nom sur le développement temporel des fonctions de distribution dans l'espace de phase et ouvre ainsi le champ à la physique statistique dont il peut être considéré comme le père. Il valide au passage l'hypothèse « atomiste » de Démocrite comme quoi *la matière peut être considérée comme un ensemble d'entités indivisibles*.

Plus récemment, la thermodynamique s'est enrichie de l'apport de la statistique : les méthodes de Monte Carlo permettent maintenant de briser la barrière des modèles macroscopiques classiques limités par leur approche empirique et d'accéder non seulement à une prédiction plus fiable des propriétés d'équilibre et de transport de la matière, mais aussi à une meilleure compréhension des phénomènes microscopique.

En écrivant *L'erreur n'est pas le contraire de la vérité. Elle est l'oubli de la vérité contraire*. Blaise Pascal, dans ses « Pensées », voulait notamment nous indiquer de façon posthume qu'un ordre sous-jacent préside à toute chose. Dans le domaine pétrolier, *la vérité contraire* c'est la thermodynamique, et l'oublier peut constituer une erreur à proprement parler « Pascalienne ». En effet, rien n'échappe à ses lois : la diagenèse, la catagenèse et la métagenèse de la matière organique dans les bassins sédimentaires, la classification des huiles brutes, leur caractérisation PVT, la production HP-HT, la production des huiles lourdes et extra-lourdes, la mise en exploitation des sables asphalténiques, le transport par pipe, le raffinage, la catalyse homogène et hétérogène et l'usage associé des zéolithes, la synthèse du *Gas to liquid*, du *Coal to liquid*, et maintenant les applications aux biocarburants.

La thermodynamique, science apparemment très fondamentale, dont la thermodynamique statistique et la simulation moléculaire sont les fruits, est ainsi en même temps essentielle pour les applications sur l'ensemble de la chaîne des procédés pétroliers. Si les fondements ont été élaborés il y a plus d'un siècle, les applications toujours plus exigeantes, et les nouveaux outils de calcul, toujours plus performants, laissent à cette science un potentiel de renouveau toujours plus grand.

Ce dossier thématique de *Oil & Gas Science and Technology* a pour ambition de broser un tableau dynamique du champ applicatif de la thermodynamique, tant classiquement en matière de modélisation de la production, de procédé sur champ, avant transport et raffinage, que de façon plus exploratoire dans ses dernières évolutions statistiques.

Son article introductif porte sur les limites des différentes modélisations thermodynamiques des fluides pétroliers, notamment l'intérêt de la méthode de « pseudoisation » pour décrire les mélanges complexes.

L'article suivant porte sur la caractérisation des bruts asphalténiques et ses voies d'amélioration via la modélisation de la floculation des asphaltènes dans différentes conditions opératoires. Ce type d'approche est crucial pour la conception ex ante des installations de production et de traitement de ces bruts.

Présentant des enjeux de production comparables en termes stratégiques, le troisième article porte sur le traitement, par absorption en solution, des gaz acides : H₂S et CO₂.

Les deux derniers articles s'appuient sur des évolutions récentes de la thermodynamique, la *Statistical-Associating Fluid Theory* (SAFT) et la modélisation moléculaire, pour proposer une évolution significative des pratiques.

Ces cinq articles ont pour vertu de montrer que notre niveau présent de connaissance, en matière de prédiction des phénomènes physiques régissant la production et le traitement des hydrocarbures liquides et gazeux, est suffisant pour conduire encore notre industrie de façon rationnelle pour les décennies à venir. Cependant, il faut garder à l'esprit la redoutable variété de défis que nous impose la combinaison d'une demande en forte croissance avec le changement climatique qui découle de cette demande.

Pour leur plus grande part, les solutions envisagées comportent encore nombre de problèmes restant à résoudre : coût de renouvellement des réserves, coût de capture et sites de stockage du CO₂, type de mise en production des champs non conventionnels, méthodes ultimes de récupération, CAPEX des unités de synthèse de GTL et de CTL ?

Ces défis montrent en fait la vastitude du domaine pétrolier et l'ardente nécessité de constituer, d'articuler et de pérenniser une chaîne de compétences de premier ordre alliant les sciences physiques fondamentales, la thermodynamique n'étant pas la moindre, avec la physique appliquée dont le génie des procédés, mais aussi les sciences de l'exploration et du forage.

Gilles Kimmerlin

Conseiller scientifique

Direction de la Recherche - Gaz de France

Membre du Comité éditorial de l'OGST

Editorial

APPLICATIONS OF THERMODYNAMICS IN THE OIL INDUSTRY

The foundations of thermodynamics were laid between 1761-1764, when Joseph Black discovered the phenomenon of latent heat before measuring the latent heat of steam, and 1876, the year when Josiah Gibbs started his work on phase equilibrium and free energy as the driving force of chemical reactions.

In 1872, however, Ludwig Boltzmann established the equation which now bears his name on the temporal development of distribution functions in phase space, thereby opening the field of statistical physics, of which he can be considered the founding father. He also validated Democritus' "atomistic" hypothesis that *matter is made up of a number of indivisible particles*.

More recently, thermodynamics has benefited from statistical approaches: the Monte Carlo methods now provide a means of breaking down the barrier of traditional macroscopic models limited by their empirical approach and obtaining not only a more reliable prediction of the equilibrium and transport properties of matter, but also a better understanding of microscopic phenomena.

By writing "*Error isn't the opposite of the verity. It is the oversight of the counter-verity.*", Blaise Pascal in his "Pensées" (Thoughts), wanted to convey posthumously that everything is governed by an underlying order. In the oil industry, *the counter-verity* is thermodynamics, and lack of it may strictly speaking represent a "Pascalian" error. Its laws apply in every field: diagenesis, catagenesis and metagenesis of organic matter in the sedimentary basins, classification of crude oils, their PVT characterisation, HP-HT production, production of heavy and extra-heavy oils, exploitation of tar sands, pipeline transport, refining, homogeneous and heterogeneous catalysis and the associated use of zeolites, gas-to-liquid and coal-to-liquid syntheses, and now the bio-fuel applications.

Thermodynamics, an apparently highly fundamental science which gave rise to statistical thermodynamics and molecular simulation, is therefore also of paramount importance for applications throughout the entire chain of petroleum processes. Although the basis were laid more than a century ago, the increasingly demanding applications and the new increasingly powerful computation tools offer this science an increasingly large revival potential.

The objective of this *Oil & Gas Science and Technology* thematic dossier is to provide a dynamic outline of the field of application of thermodynamics, both classically with respect to production modelling, process on field, before transport and refining, and through a more exploratory approach in its latest statistical evolutions.

Its introductory article concerns the limits of the various thermodynamic models of petroleum fluids, in particular the benefit of the "pseudoisation" method to describe complex mixtures.

The next article concerns the characterisation of asphaltenic crudes and how it can be improved by modelling asphaltene flocculation under various operating conditions. This type of approach is vitally important in the *ex ante* design of installations producing and processing these crudes.

The third article concerns the treatment, by absorption in solution, of acid gases: H₂S and CO₂, where production stakes are comparable in strategic terms.

The last two articles based on recent breakthroughs in thermodynamics, the Statistical-Associating Fluid Theory (SAFT) and molecular modelling, propose a significant change in practices.

These five articles demonstrate that, as things stand, we have sufficient knowledge of the prediction of physical phenomena governing the production and treatment of liquid and gaseous hydrocarbons to guide our industry rationally for several decades to come. We must nevertheless bear in mind the impressive range of challenges stemming from the combination of sharply increasing demand and the climate change resulting from this demand.

Most of the solutions considered still contain many unresolved problems: cost of renewing reserves, cost of CO₂ capture and storage sites, type of production to be implemented on non-conventional fields, ultimate recovery methods, CAPEX of GTL and CTL synthesis units?

These challenges reveal the vastness of the oil industry and the pressing need to create, structure and perpetuate a first class chain of skills combining the fundamental physical sciences—of which thermodynamics is one of the most important—and applied physics including process engineering, but also the exploration and drilling sciences.

Gilles Kimmerlin

Scientific adviser

Research Management - Gaz de France

Member of the OGST Editorial Committee