

Simulation numérique multiphasique des couplages thermo-hydro-chimiques en milieux poreux.

N. Pillardou^{1,2}, E. AHUSBORDE¹, F. CROCCOLO²

¹ Université de Pau et des Pays de l'Adour, E2S UPPA, CNRS, LMAP, Pau, France,

² Université de Pau et des Pays de l'Adour, E2S UPPA, CNRS, Total, LFCR, Anglet, France

Email : nicolas.pillardou@univ-pau.fr

Mots Clés : Volume Finis, HPC, Simulation numérique, Ecoulements multiphasiques en milieux poreux, Transport réactif, Stockage géologique du CO₂

Biographie – Nicolas Pillardou est diplômé d'un Master en Mathématiques, Modélisation et Simulation de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour. Sa thèse, intitulée "Modeling and Multiscale HPC Simulation of CO₂ Storage in Saline Aquifers", a débuté le 1er Octobre 2020. Elle est financée par la Chaire Industrielle CO₂ES et E2S UPPA. Elle porte sur des problèmes environnementaux liés à la réduction des émissions de gaz à effet de serre grâce au stockage du CO₂ en aquifères salins.

Resumé :

Les écoulements réactifs multiphasiques en milieu poreux interviennent dans diverses problématiques énergétiques et environnementales. On peut citer de façon non exhaustive le stockage géologique de gaz (CO₂, naturel, H₂), la gestion des déchets nucléaires, l'ingénierie pétrolière, ou bien la production d'énergie géothermale. Ces phénomènes se déroulent généralement sur des échelles de temps très longues et dans des réservoirs de grandes tailles, rendant ainsi la simulation numérique et le calcul haute performance essentiels.

Les écoulements multiphasiques réactifs sont modélisés par des lois de conservation de la masse pour chaque composant chimique i et dans chaque phase $\alpha \in \{l, g, s\}$ (liquide, gaz, solide) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S_\alpha \rho_{mol,\alpha} x_\alpha^i) + \nabla \cdot (\rho_{mol,\alpha} x_\alpha^i \vec{q}_\alpha - \rho_{mol,\alpha} D_\alpha^i \nabla x_\alpha^i) = \sum_{k=1}^K v_{ik} r_k^K + \sum_{q=1}^Q v_{iq} r_q^Q, \quad (1)$$

avec ϕ la porosité, S_α , $\rho_{mol,\alpha}$, x_α^i et D_α^i représentant respectivement la saturation, la densité molaire, la fraction molaire et la diffusivité du composant i dans la phase α . Dans le second membre, K et Q représentent respectivement le nombre de réactions chimiques cinétiques et à l'équilibre, v_{ij} le coefficient stoechiométrique du composant i dans la réaction j , et r^K , r^Q les taux de réactions cinétique et à l'équilibre. \vec{q}_α désigne la vitesse d'écoulement de la phase α donnée par la loi de Darcy :

$$\vec{q}_\alpha = -\frac{k_{r,\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbb{K} (P_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}), \quad (2)$$

avec \mathbb{K} perméabilité intrinsèque, $k_{r,\alpha}$, μ_α et P_α représentant respectivement la perméabilité relative, la viscosité et la pression dans la phase α .

Les lois de conservations de la masse sont couplées à une équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \sum_\alpha \rho_\alpha u_\alpha S_\alpha + (1 - \phi) \rho_s c_s T \right) + \nabla \cdot \left(-\lambda_{pm} \nabla T + \sum_\alpha \rho_\alpha h_\alpha \vec{q}_\alpha \right) = q^h, \quad (3)$$

avec ρ_α la densité massique, u_α l'énergie interne spécifique et h_α l'enthalpie de la phase α . c_s représente la capacité calorifique, λ_{pm} la conductivité thermique et T la température.

Les réactions chimiques sont représentées grâce aux taux de réactions dans (1) qui sont soit fonction de la concentration dans le cas de réactions cinétiques (r^K) soit inconnus pour les réactions à l'équilibre (r^Q). Les réactions cinétiques sont modélisées sous la forme d'équations différentielles ordinaires telles que :

$$\frac{dc_s^i}{dt} = -r_i^K, \text{ avec } r_i^K = K_s^i A_s^i \left(1 - K^i \prod_j (a_\alpha^j)^{v_{ij}} \right), \quad (4)$$

avec c_s^i la concentration du composant i dans la phase solide s et a_α^j l'activité du composant j dans la phase α . K_s^i et A_s^i sont respectivement la constante du taux de réaction et la surface réactive de l'espèce i et K^i est la constante d'équilibre.

En utilisant le formalisme de Morel, les taux de réactions à l'équilibre r^Q inconnus dans (1) peuvent être éliminés à l'aide de transformations linéaires. Le système chimique est alors fermé à l'aide de lois d'actions de masse qui s'écrivent :

$$\prod_j (a_\alpha^j)^{v_{ij}} = K^i. \quad (5)$$

Ce sont des équations algébriques reliant les activités a_α^i (et fractions molaires x_α^i) des différentes espèces.

Le système (1)-(5) est fermé par des lois de pression capillaire, des équations d'états et des lois de solubilité caractérisant l'équilibre de chaque phase. Ces écoulements sont donc régis par un système non linéaire d'équations aux dérivées partielles dégénérées (1)-(3), couplées à des équations différentielles ordinaires (4) et des équations algébriques (5). Les inconnues du système sont les pressions P_α , les saturations S_α , les fractions molaires x_α^i et la température T .

Afin de résoudre ce système couplé, nous avons développé et implémenté une méthode volume finis totalement implicite dans le cadre de la plateforme DuMu^X [3]. La discrétisation temporelle est effectuée à l'aide d'un schéma Backward Differentiation Formula 2 (BDF2) tandis que la discrétisation spatiale est basée sur une méthode "cell-centered". La résolution globale de notre problème s'écrit sous la forme d'un système non linéaire qui est résolu en utilisant une méthode de Newton avec un pas de temps adaptatif. Les systèmes linéaires sont résolus à l'aide de solveurs fournis par la librairie DUNE [1] (solveur Bi-Conjugate Gradient Stabilized (BiCG-STAB) couplé à un préconditionneur AMG). La parallélisation est effectuée en utilisant la librairie parallèle DUNE, basée sur le langage MPI, qui offre une grande efficacité de calcul parallèle. Cette parallélisation permet de simuler des problèmes de plusieurs dizaines de millions de degrés de liberté, ce qui est idéal pour des applications à l'échelle du réservoir impliquant un système chimique complexe.

Pour valider notre méthodologie nous avons considéré un cas 3D d'injection de CO₂ dans un aquifère salin. Une comparaison avec une simulation isotherme [2] afin de mettre en avant l'influence de la température ainsi que des calculs parallèles seront présentés.

Références

- [1] P. Bastian, M. Blatt, and A. Dedner et al. The DUNE framework: Basic concepts and recent developments. *Computers & Mathematics with Applications*, 81:75–112, 2019.
- [2] M Id Moulay. *Simulation numérique 3D d'Écoulement Multiphysiques Réactifs en Milieu Poreux*. Thèse de doctorat, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2019.
- [3] T. Koch, D. Gläser, and K. Weishaupt et al. DuMu^X3 – an open-source simulator for solving flow and transport problems in porous media with a focus on model coupling. *Computers & Mathematics with Applications*, 81:423–443, 2019.