

Simulation numérique d'écoulements diphasiques multiconstituants avec transport réactif en milieu poreux : application au stockage géologique du CO₂

Etienne AHUSBORDE, UPPA & CNRS

Michel KERN, Inria Paris–Rocquencourt & Maison de la Simulation

Viatcheslav VOSTRIKOV, UPPA & Maison de la Simulation

Mots-clés : simulation numérique, milieu poreux, écoulement diphasique, transport réactif.

Les écoulements souterrains interviennent dans de nombreux sujets liés à l'environnement. Dans plusieurs situations, les interactions entre les espèces chimiques présentes en solution et la matrice rocheuse jouent un rôle fondamental. Une situation d'intérêt particulier est la séquestration du CO₂ dans un aquifère salin, qui conduit à l'étude d'un écoulement diphasique (eau-gaz) couplé avec la géochimie (étude des réactions) [1].

Ainsi on considère un système diphasique multiconstituant dans un milieu poreux avec réactions chimiques. Les équations régissant ce modèle sont obtenues en écrivant les équations de conservation de la masse, la loi de Darcy généralisée et la loi de la pression capillaire. Le couplage avec la chimie intervient par l'intermédiaire des taux de réactions, qui peuvent être soit des fonctions (non-linéaires) données des concentrations, dans le cas de réactions cinétiques, soit inconnus pour des réactions à l'équilibre. Dans ce dernier cas, chaque réaction donne lieu à une loi d'action de masse, soit une relation algébrique liant les concentrations des espèces concernées. Le système obtenu va donc coupler des équations aux dérivées partielles avec des équations algébriques.

Notre objectif est de développer une méthode numérique performante implémentée dans la plate-forme libre DuMu^X [2] pour la simulation de ce système. Pour cela, nous adoptons une approche séquentielle :

1. Dans un premier temps, on utilise une méthode volumes-finis pour résoudre un système simplifié avec deux phases et deux constituants en considérant l'eau et le CO₂ comme des composants dominants.
2. Dans un second temps, on résout un problème de transport réactif pour les autres composants en utilisant une méthode SIA (Sequential Iterative Approach). Le transport et la chimie sont traités alternativement. Un module basé sur une méthode volumes-finis pour traiter le transport a été implémenté dans DuMu^X. Le système non-linéaire modélisant l'équilibre chimique est résolu par une méthode hybride de Powell.

Nous présenterons une stratégie de couplage entre ces deux étapes puis des résultats numériques obtenus par notre approche dans le cadre de la simulation numérique du stockage géologique du CO₂.

Remerciements

Ce travail a bénéficié du soutien du Conseil Régional d'Aquitaine et du CEA-INSTN.

Références

- [1] F. ZHANG, G. YEH, PARKER J. C., *Groundwater reactive transport models*, 2012.
- [2] B. FLEMISCH ET AL. *DuMux: DUNE for Multi-{Phase, Component, Scale, Physics, ...} Flow and Transport in Porous Media*, *Advances in Water Resources* 34(9): 1102-1112 (2010).

Etienne AHUSBORDE, LMA Pau, Bâtiment IPRA - UPPA, Avenue de l'Université - BP 1155, 64013 Pau Cedex

etienne.ahusborde@univ-pau.fr

Michel KERN, INRIA, CRI Paris–Rocquencourt, BP 105, 78153 Le Chesnay Cedex & Maison de la Simulation, Digiteo Labs, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex

michel.kern@inria.fr

Viatcheslav VOSTRIKOV, LMA Pau, Bâtiment IPRA - UPPA, Avenue de l'Université - BP 1155, 64013 Pau Cedex & Maison de la Simulation, Digiteo Labs, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex

viatcheslav.vostrikov@univ-pau.fr