

Simulation numérique des couplages entre écoulements diphasiques et réactions géochimiques en milieux poreux

Etienne Ahusborde, Université de Pau et des Pays de l'Adour

Brahim Amaziane, Université de Pau et des Pays de l'Adour

Mohamed Id Moulay, Université de Pau et des Pays de l'Adour

Mots-clés : transport réactif, milieu poreux, approche totalement implicite, volumes finis, DuMu^X, écoulements diphasiques

L'objectif de ce travail est de développer un code parallèle pour le couplage entre écoulements diphasiques et réactions géochimiques en milieux poreux. Le problème est modélisé par un système fortement non linéaire d'EDPs (modèle d'écoulement multiphasique compositionnel en milieux poreux) couplées à des équations différentielles ordinaires ou algébriques (pour modéliser respectivement les réactions chimiques cinétiques et à l'équilibre) [1].

On construit un schéma volumes finis totalement implicite qui résout l'intégralité du système à chaque itération en temps. L'approche totalement implicite permet d'éviter les erreurs du splitting des méthodes séquentielles, surtout pour des problèmes avec un fort couplage entre l'écoulement et le transport réactif. Suivant cette approche, deux nouveaux modules 1pNc-react et 2pNc-react de transport réactif (respectivement 1 phase et 2 phase, N composants) ont été implémentés dans DuMu^X, un simulateur libre pour les problèmes d'écoulements et de transport dans les milieux poreux [2]. Une attention particulière est portée sur la stratégie du pas de temps pour améliorer la convergence de la méthode de Newton ainsi que sur l'amélioration des solveurs itératifs et des préconditionneurs pour les systèmes linéaires. Le code est massivement parallèle par le biais du protocole de communication parallèle MPI et permet de réaliser des simulations réalistes à grandes échelles avec des millions de cellules.

Le module 1pNc-react a été validé sur le benchmark MoMaS et d'autres cas tests dans la littérature [3]. Pour le module 2pNc-react, on présente des résultats numériques bi et tridimensionnels pour des applications de stockage géologique du CO₂. Une comparaison quantitative de l'approche totalement implicite et de l'approche séquentielle [4] est établie moyennant la même plateforme. Enfin une étude de scalabilité est faite avec des simulations parallèles sur différentes résolutions de grille.

Références

- [1] F. ZHANG & AL, *Groundwater reactive transport models*, Bentham e-books, 2012.
- [2] B. FLEMISCH & AL, *DuMu^X: DUNE for Multi-{Phase, Component, Scale, Physics,...} flow and transport in porous media*, *Adv. Water Resour.*, 34, 1102-1112 2011.
- [3] E. AHUSBORDE, M. EL OSSMANI, M. ID MOULAY, *A fully implicit finite volume scheme for single phase flow with reactive transport in porous media*, *Mathematics and Computers in Simulation*, <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2018.09.001>, 2018.
- [4] E. AHUSBORDE, B. AMAZIANE, M. EL OSSMANI, *Improvement of numerical approximation of coupled multiphase multicomponent flow with reactive geochemical transport in porous media*, *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP Energies nouvelles*, 73, 73, 2018.

Mohamed Id Moulay, CNRS / UNIV PAU & PAYS ADOUR/ E2S UPPA, LABORATOIRE DE MATHEMATIQUES ET DE LEURS APPLICATIONS DE PAU - Fédération IPRA, UMR5142 64000, PAU, FRANCE
mohamed.id-moulay@univ-pau.fr

Etienne Ahusborde, CNRS / UNIV PAU & PAYS ADOUR/ E2S UPPA, LABORATOIRE DE MATHEMATIQUES ET DE LEURS APPLICATIONS DE PAU - Fédération IPRA, UMR5142 64000, PAU, FRANCE
etienne.ahusborde@univ-pau.fr

Brahim Amaziane, CNRS / UNIV PAU & PAYS ADOUR/ E2S UPPA, LABORATOIRE DE MATHEMATIQUES ET DE LEURS APPLICATIONS DE PAU - Fédération IPRA, UMR5142 64000, PAU, FRANCE
brahim.amaziane@univ-pau.fr