

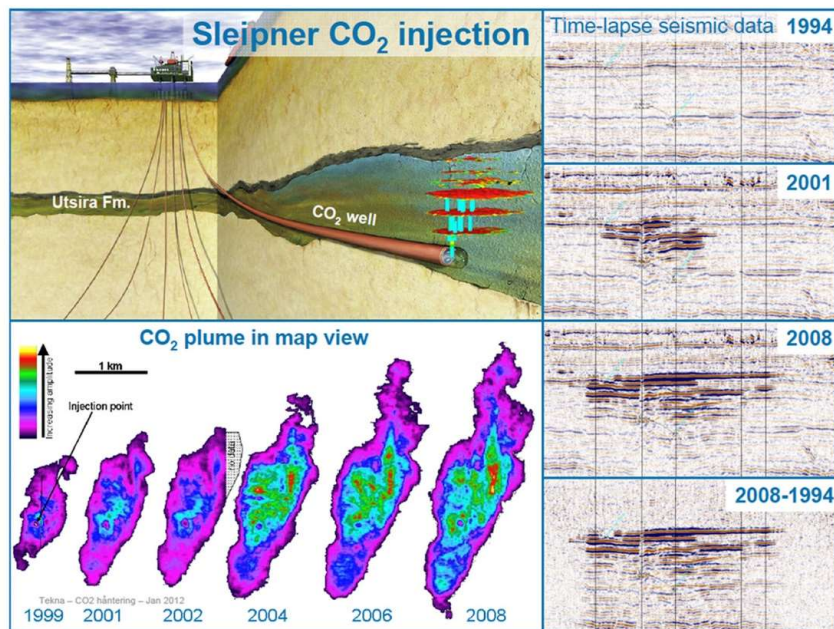
*MODÉLISATION DU COUPLAGE ENTRE  
L'ÉCOULEMENT, LA CHIMIE ET LA GÉO-MÉCANIQUE  
DANS GEOXIM*

**Rencontres Arcane**

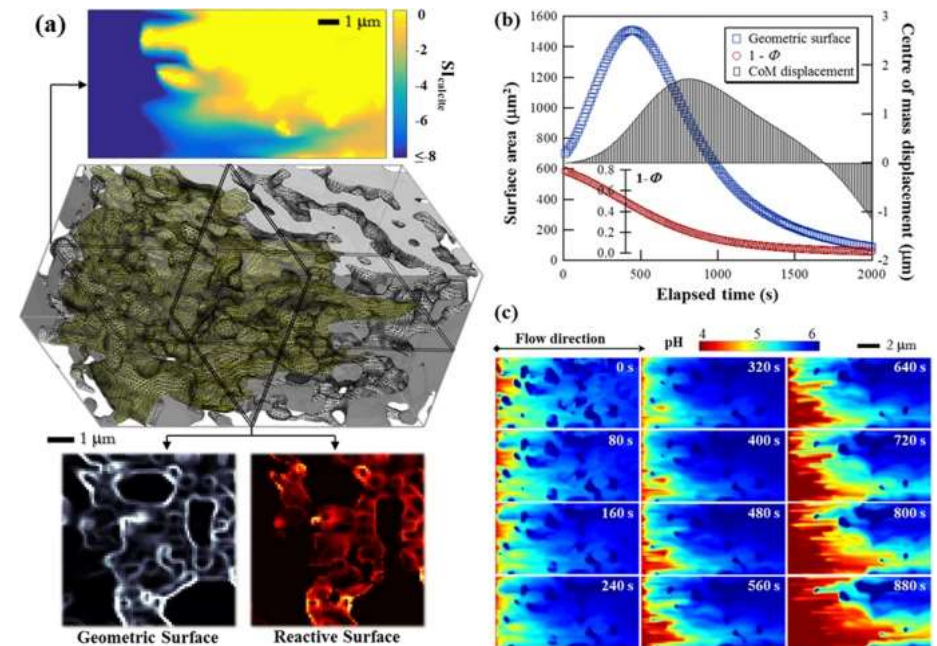
17 avril 2023



# MOTIVATION

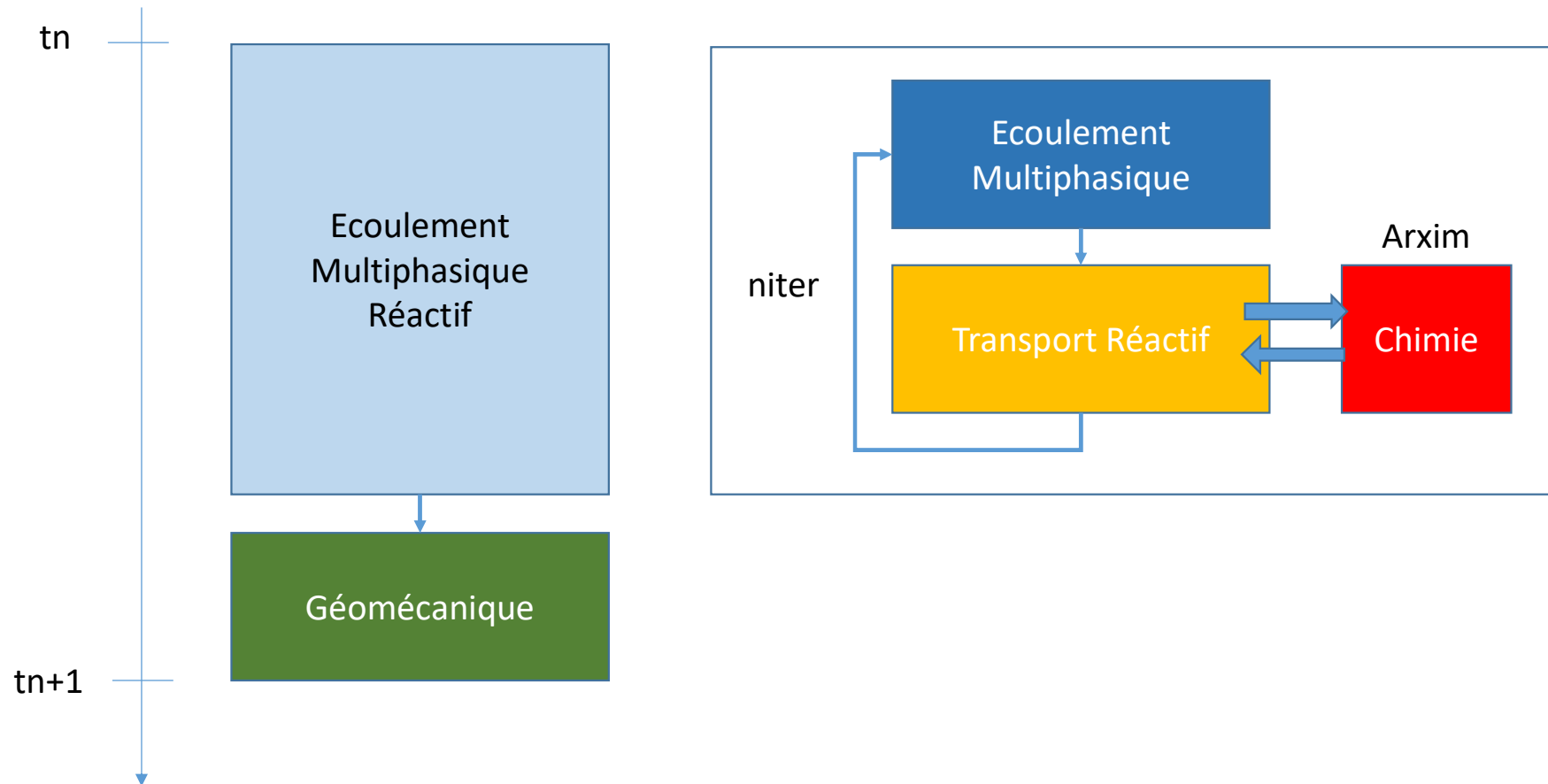


Etude des interactions fluide-roche dans le sous sol  
Stockage de gaz, réinjection d'eau déséquilibrée, ...



Etude des processus couplés au laboratoire  
Calage des cinétiques et lois de comportement

## SCHÉMA DE COUPLAGE DES MODÈLES



# MODÈLE D'ÉCOULEMENT MULTIPHASIQUE

## ● Equations

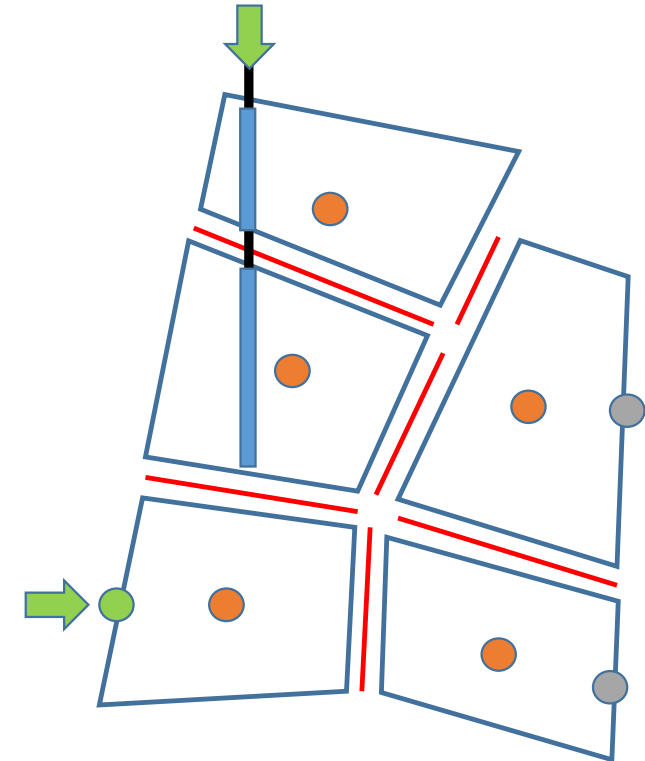
- Bilan matière composants :  $\frac{\partial n_k}{\partial t} + \sum_{\alpha} \text{div} (U_{\alpha} c_k^{\alpha}) + Q_k = 0$
- Equilibre thermodynamique :  $\mu_k^{\alpha} = \mu_k^{\beta}$

## ● Formulation de Coats

- Inconnues variables d'état naturelles :  $P, \phi, S_{\alpha}, X_j$
- Inconnues activées par maille selon le contexte
- Pré-élimination des équations locales

## ● Variables secondaires (lois physiques)

- Thermodynamique :  $M_{\alpha}, \rho_{\alpha}, \mu_{\alpha}, H_{\alpha}$
- Potentiel chimique :  $K_j, \gamma_j$
- Pétrophysique :  $K_f, K_{r\alpha}, P_{c\alpha}$
- Volume et compaction :  $V$



Discretisation FVM (Finite Volume Method)  
Inconnues aux mailles, discrétisation des flux

$X = \{ U_k[i] \}$ , k maille, i variable ( $P, \phi, X_j, S_{\alpha}, \dots$ )

Système non-linéaire (Newton)

Taille du système linéaire = nb\_cell \* nb\_compo

# MODÈLE DE TRANSPORT RÉACTIF MONOPHASIQUE

## ● Equations

- Bilan matière éléments :  $A_{ele,aqu} \left( \frac{\partial n_{jaqu}}{\partial t} + \text{div} (U_w c_{jaqu}^w) + Q_{jaqu} + R_{jaqu} \right) = 0$

- Bilan matière minéraux :  $\frac{\partial n_{jmin}}{\partial t} + R_{jmin} = 0$

- Equilibre spéciation aqueuse :  $S_{eq} \mu_j = 0$

## ● Formulation en variable extensive :

- Inconnues :  $n_j = (n_{jaqu}, n_{jmin})$
- $P, T, U_w, Q_w$  donnés (écoulement)

## ● Variables secondaires (lois physiques)

- Potentiel chimique :  $K_{jaqu}, \gamma_{jaqu}, K_{jmin}$
- Cinétique eau-minéraux :  $\tau_{min}$

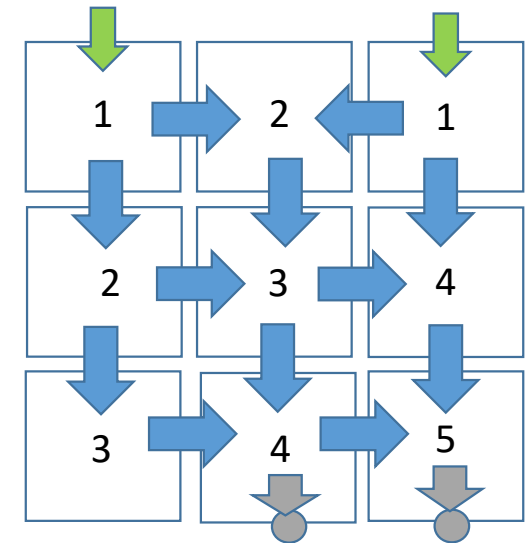


Schéma FastUpwind

Graphe de mailles ordonnées

Flux décentrés amont

$X_k = \{ U_k[i] \}$ ,  $k$  maille,  $i$  variable ( $n_j$ )

Pas de temps local adaptatif par maille

Système non-linéaire (Newton) par maille

Taille du système linéaire =  $nb\_species$

# MODÈLE DE GÉO-MÉCANIQUE

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}, \epsilon(u) = \frac{1}{2} (\nabla u + (\nabla u)^T)$$

## Equations

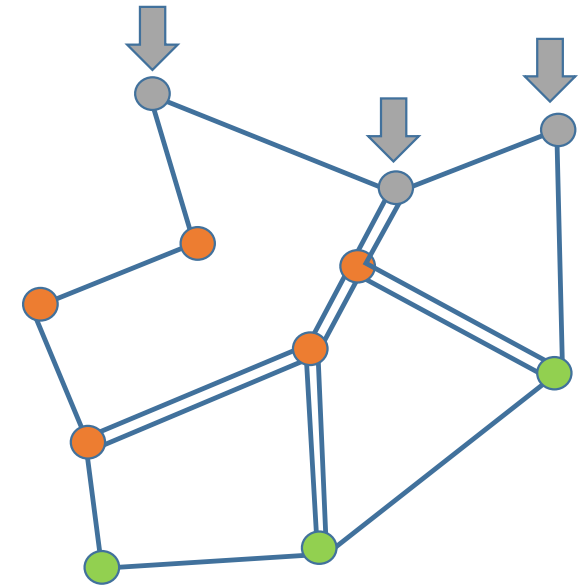
- Equilibre mécanique :  $\text{div}(\sigma) + \rho_b g = 0$
- Poro-élasticité :  $\sigma = C : \epsilon(u) - b P_f Id$

## Formulation en déplacement, incrémentale

- Inconnue incrément de déplacement :  $\Delta u$
- Contrainte initiale équilibrée :  $\sigma_0$
- Incrément de contrainte :  $\Delta \sigma = C : \epsilon(\Delta u) - b \Delta P_f Id$

## Variables secondaires (lois physiques)

- Propriétés du milieu poreux :  $P_f, \rho_b$
- Modules d'élasticité :  $\lambda, \mu$

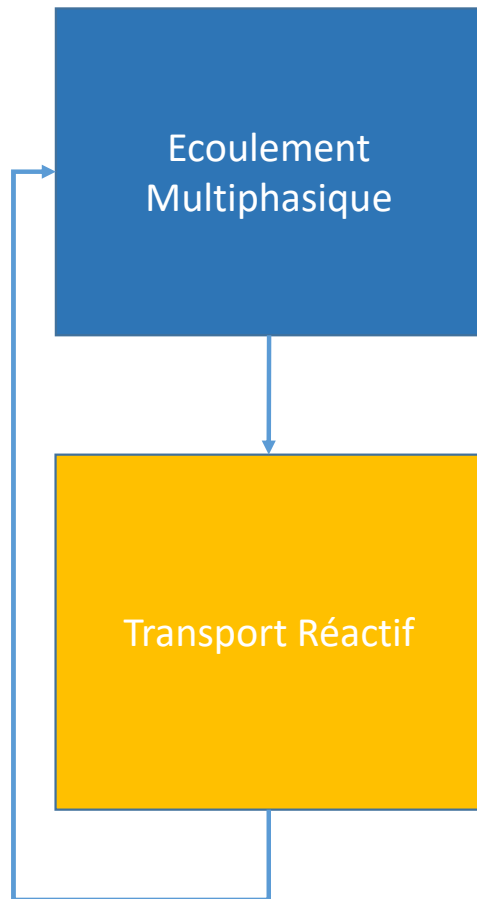


Discretisation VEM (Virtual Element Method)  
Inconnues aux nœuds, forme bilinéaire discrète

$X = \{ [u_1, u_2, u_3]_n \}, n \text{ noeud}$

Taille du système linéaire =  $\text{nb\_node} * 3$

# COUPLAGE SÉQUENTIEL ÉCOULEMENT – TRANSPORT RÉACTIF



prock

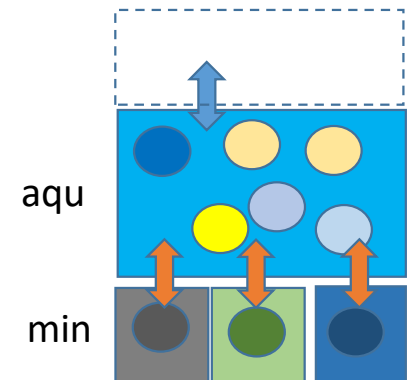
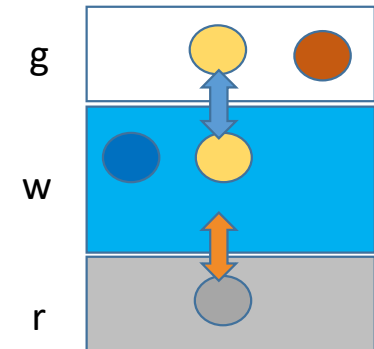
$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \sum_{\alpha} \text{div} (U_{\alpha} c_k^{\alpha}) + Q_k + R_{kaqu} = 0$$

$$\frac{\partial n_{krock}}{\partial t} + R_{kro} = 0$$

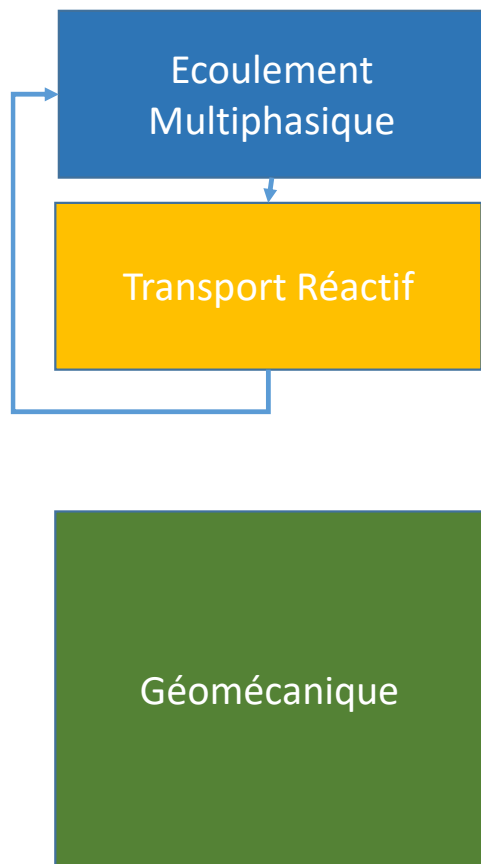
P T Sw

$$A_{ele,aqu} \left( \frac{\partial n_{jaqu}}{\partial t} + \text{div} (U_w c_{jaqu}^w) + Q_w c_{jaqu}^w + R_{jaqu} \right) + T_{ele} = 0$$

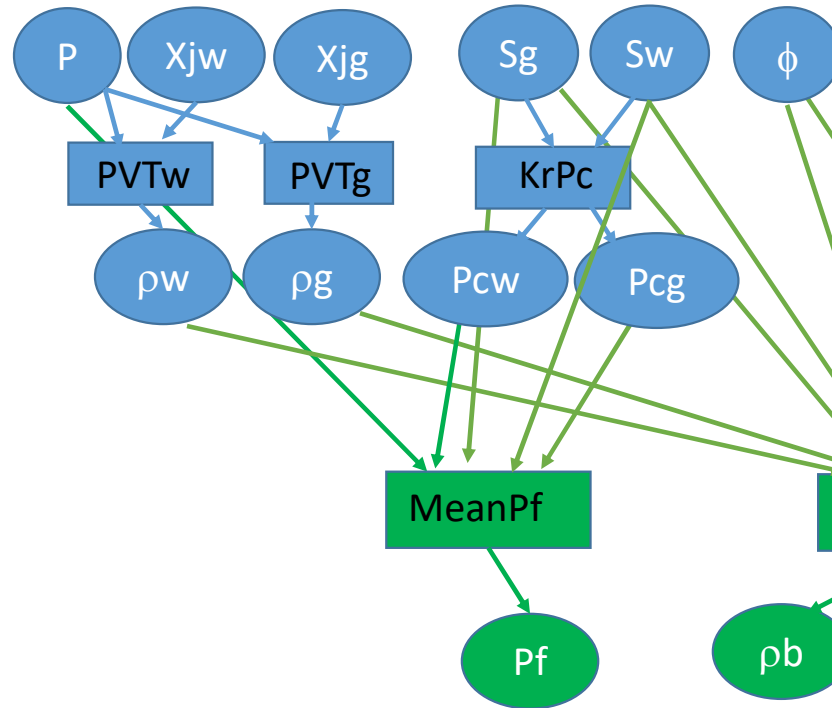
$$\frac{\partial n_{jmin}}{\partial t} + R_{jmin} = 0$$



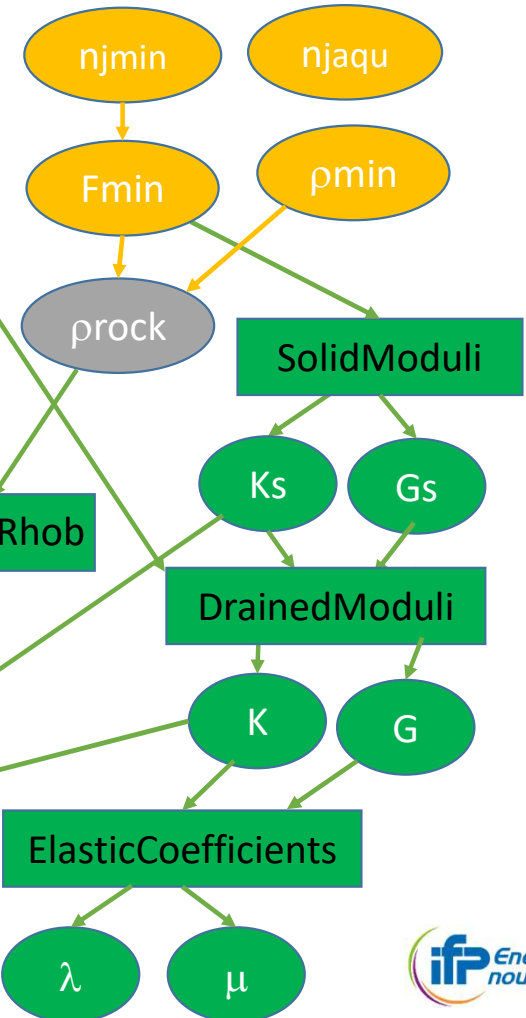
# COUPLAGE ÉCOULEMENT RÉACTIF – GÉO-MÉCANIQUE



Variables écoulement + lois écoulement



Variables transport réactif



Variables mécaniques + lois mécanique



# TEST SYNTHÉTIQUE PLUGFLOW REACTIF

## ● Géométrie

- Cylindre vertical
- $H = 5 \text{ cm}$ ,  $D = 2.5 \text{ cm}$

## ● Système physique

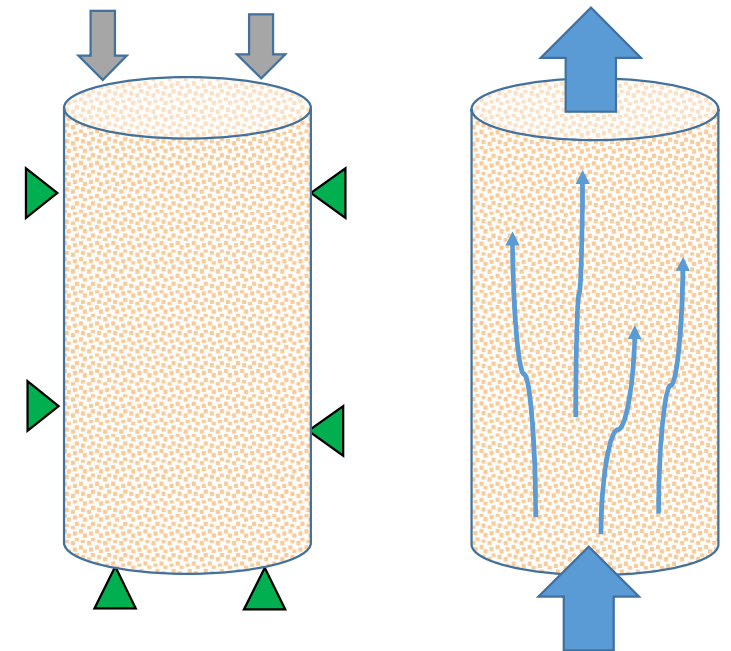
- Water =  $\{\text{H}_2\text{O}, \text{H}^+, \text{CO}_2(\text{aq}), \text{Ca}^{++}, \text{SiO}_2(\text{aq}), \dots\}$
- Rock =  $\{\text{Calcite}, \text{Quartz}\}$

## ● Etat initial

- Porosité uniforme :  $\phi = 0.2$
- Perméabilité hétérogène
  - $K_{\min} = 4.8\text{e-}14 \text{ m}^2 \sim 48 \text{ mD}$
  - $K_{\max} = 2.5\text{e-}12 \text{ m}^2 \sim 2500 \text{ mD}$
- Minéralogie : 50 % Calcite, 50 % Quartz
- Eau équilibrée, pH 7

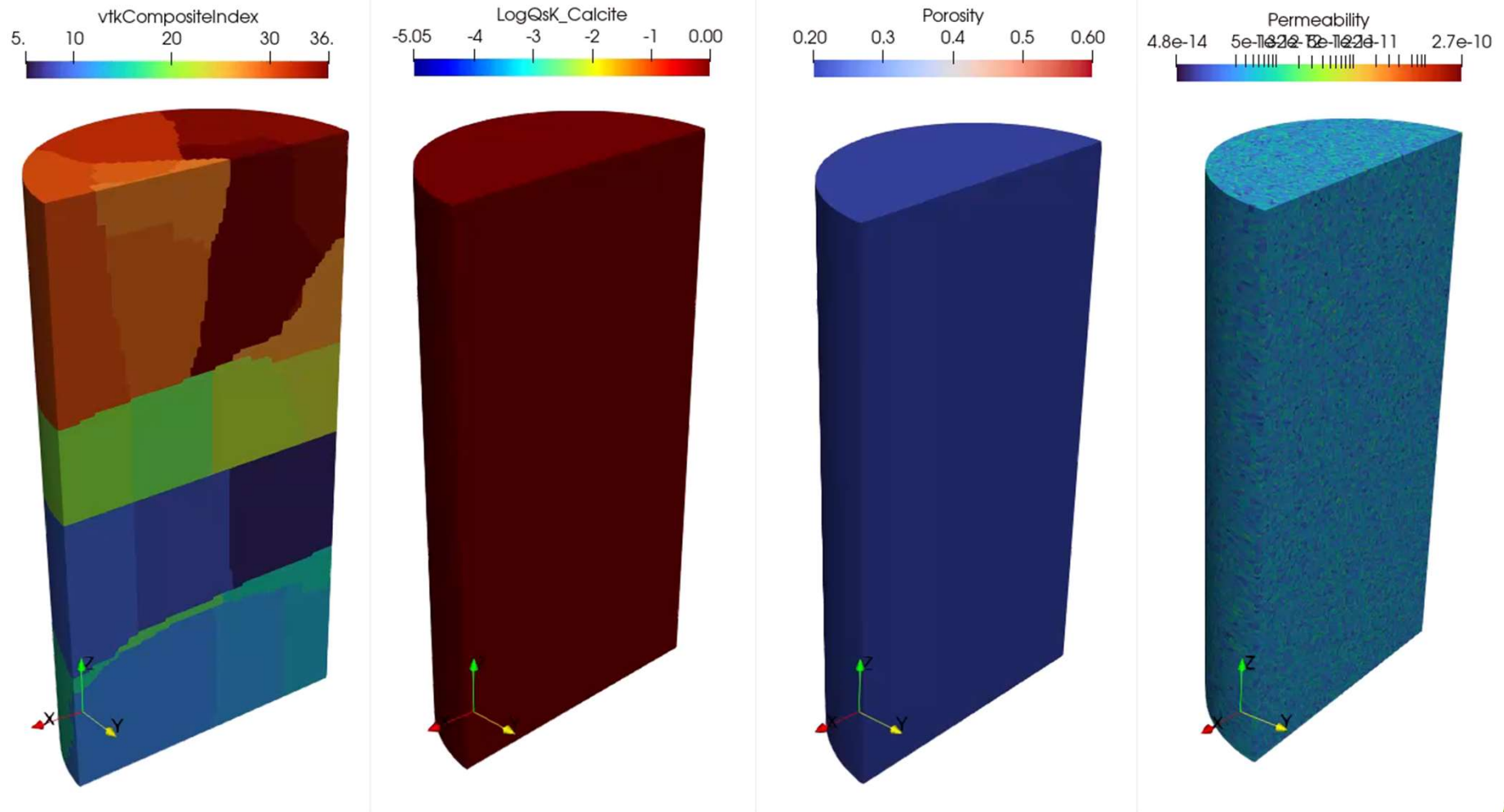
## ● Scénario

- $T = 0$  à 0.01 jours, chargement, application des contraintes
- $T = 0.01$  à 100 jours, injection d'eau acide (sous contraintes)

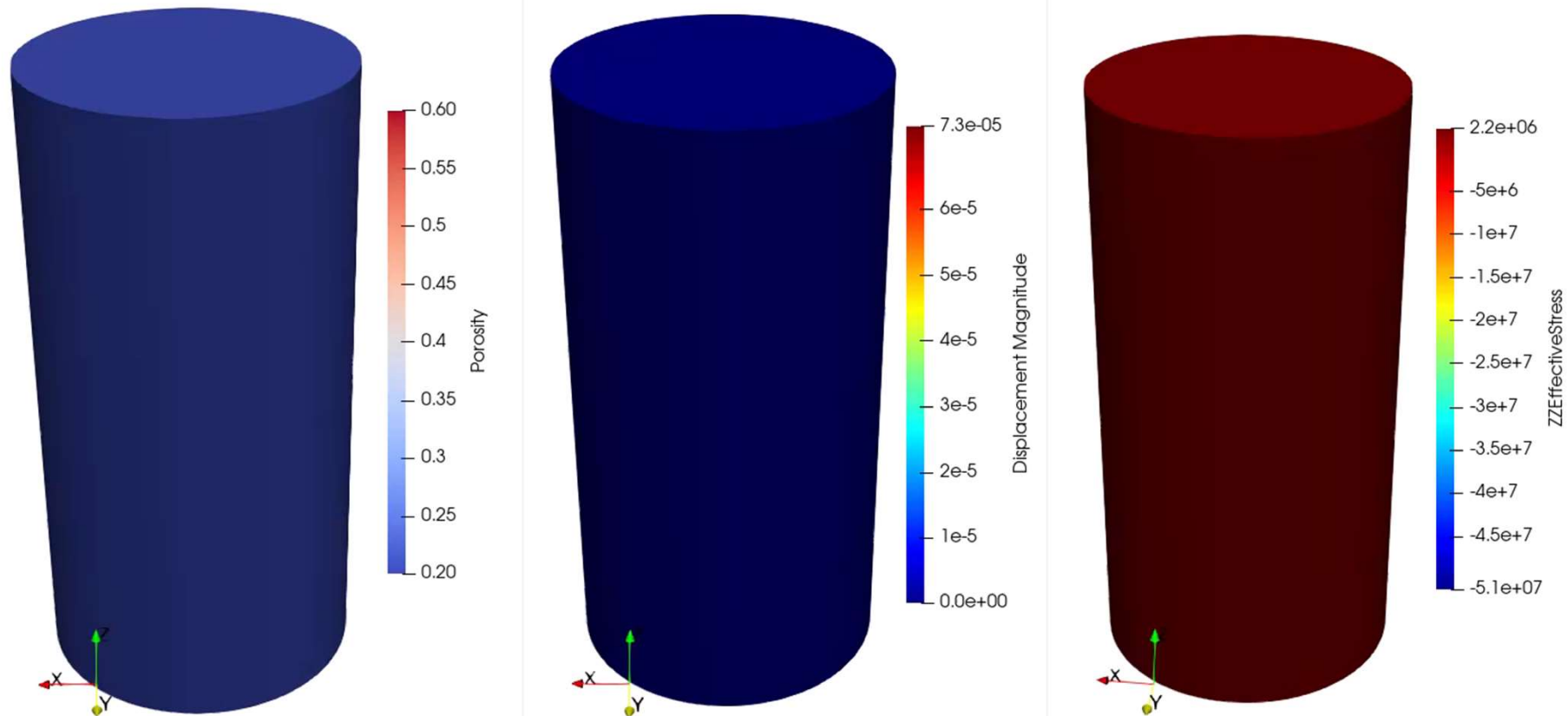


Eau acide, pH 4  
 $\text{Log}(Q/K) \text{ Calcite} = -5$

## SIMULATION GEOXIM : RÉSULTATS ECOULEMENT RÉACTIF



## SIMULATION GEOXIM : RÉSULTATS GEO-MÉCANIQUE



## QUELQUES INFOS SUR LES TEMPS DE CALCUL OBSERVÉS (À ANALYSER)

### ● Ecoulement Réactif (N=1)

- n=1 : 35454 s
- n=36, parallel-tol = 0 : 54110 s
- n=36, parallel-tol = 1.e-8 : 20747 s
- n=36, parallel-tol = 1.e-2 : 5763 s
- **n=36, parallel-iter = 2 : 2706 s**
- n=36, parallel-iter = 1 : 1803 s

### ● Ecoulement Réactif + Géoméca (N=1, n=36)

- TotalReel : 7918 s
- Ecoulement (IFPSolver CprAMG) : 419 s
- Transport Réactif (GraphSolver + parallel-iter =2) : 2207 s
- Géo-mécanique (BiCGStab – ILU0) : 4358 s

## PERSPECTIVES

### ● **Transport Réactif**

- Amélioration : robustesse et performance du calcul de chimie
- Parallélisme : décomposition de domaine, splitting, autres idées ?

### ● **Géo-mécanique**

- Solveur linéaire multi-grille adapté

### ● **Couplage écoulement - transport réactif**

- Comparaison avec les méthodes fully-implicit

### ● **Couplage écoulement réactif – géo-mécanique**

- Formulation « two-way coupling » compatible avec la dissolution/précipitation

### ● **Cas tests :**

- Etude de minéralogies et textures plus complexes (basaltes, grès, ciments, ...)

*Innover les énergies*

Retrouvez-nous sur :

 [www.ifpenergiesnouvelles.fr](http://www.ifpenergiesnouvelles.fr)

 @IFPENinnovation

