

# Modélisation stochastique de la migration de CO<sub>2</sub> dans un aquifère hétérogène

**Claude Mügler**  
**Emmanuel Mouche**

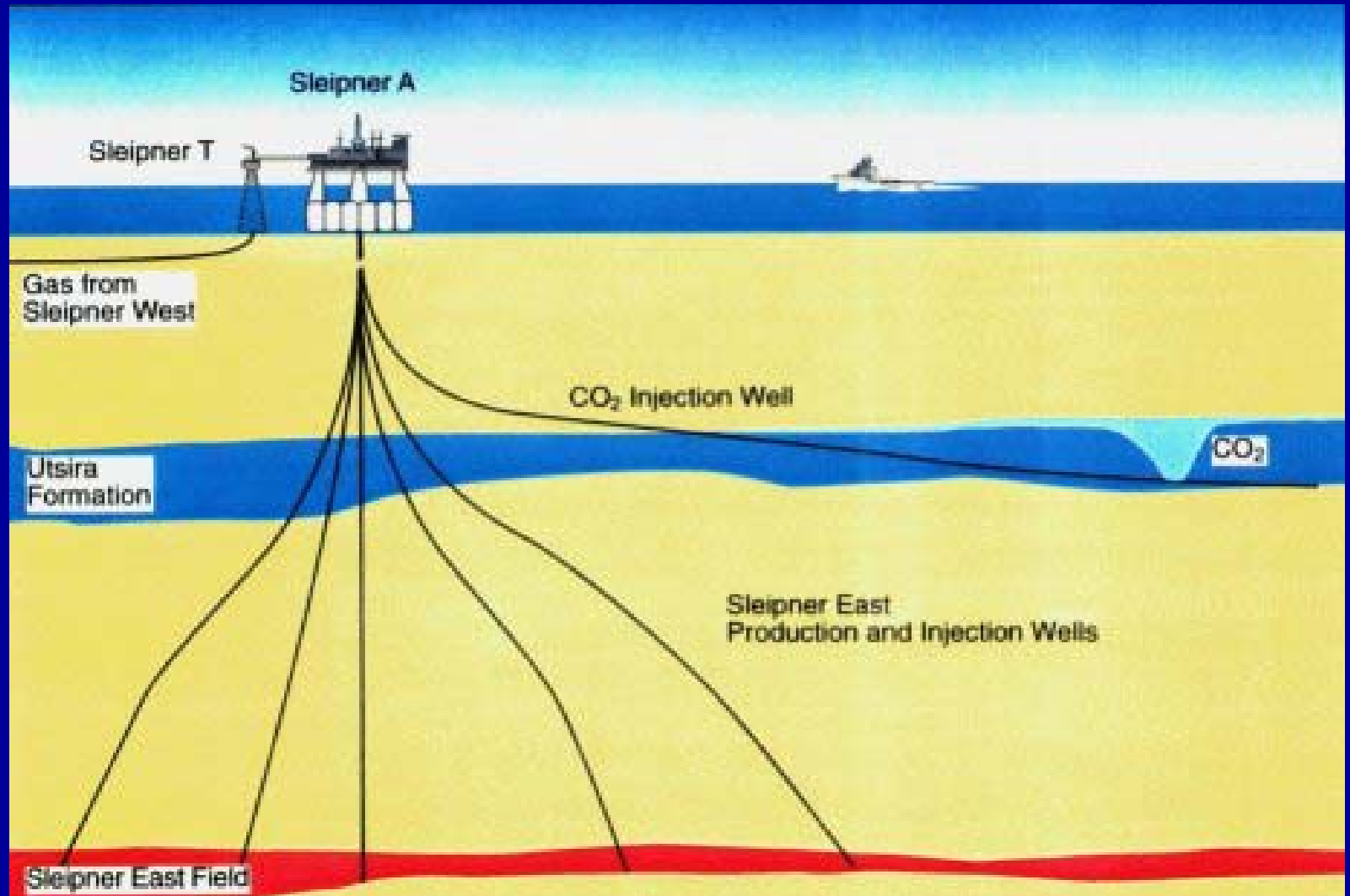
*Projet « Minéralisation du CO<sub>2</sub> », ACI Énergie du CNRS (2004-2007)*

*Projet ANR « Hétérogénéités-CO<sub>2</sub> » (2007-2009)*



**LSCE ( Laboratoire CEA/CNRS/UVSQ )**

# Principe du stockage du



# Sommaire

- Modèle diphasique
- Influence des perméabilités
- Modélisation stochastique
- Conclusions et Perspectives



# Modèle diphasique (1/3)

Soit un fluide 1 injecté dans une matrice poreuse saturée de fluide 2 ( $S^{(i)}, \rho^{(i)}$ ) :

• *Équations de conservation*

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \omega \sum_{\beta=G,L} X_{\beta}^{(i)} \rho_{\beta} S_{\beta} \right) + \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{\beta=G,L} X_{\beta}^{(i)} \rho_{\beta} \vec{u}_{\beta} \right) = q^{(i)}$$

• *Loi de Darcy généralisée*

$$\vec{u}_{\beta} = -k_{r\beta}(S_{\beta}) \frac{K}{\mu_{\beta}} \vec{\nabla} (P_{\beta} + \rho_{\beta} g z)$$

• *Loi de pression capillaire*

$$P_L - P_G = P_c(S_G, S_L)$$

$$S_G + S_L = 1$$



# Modèle diphasique (2/3)

Soit un fluide 1 injecté dans une matrice poreuse saturée de fluide 2 ( $S^{(i)}, \rho^{(i)}$ ) :

• Équations de conservation

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \omega \sum_{\beta=G,L} X_{\beta}^{(i)} \rho_{\beta} S_{\beta} \right) + \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{\beta=G,L} X_{\beta}^{(i)} \rho_{\beta} \vec{u}_{\beta} \right) = q^{(i)}$$

• Loi de Darcy généralisée

$$\vec{u}_{\beta} = -k_{r\beta}(S_{\beta}) \frac{\bar{K}}{\mu_{\beta}} \vec{\nabla} (P_{\beta} + \rho_{\beta} g z)$$

perméabilités relatives

$$P_L - P_G = P_e(S_G, S_L)$$

$$S_G + S_L = 1$$

perméabilité intrinsèque  
 $K=10^{-14}, 5 \times 10^{-13}$  et  $10^{-11}$  m<sup>2</sup>



# Modèle diphasique (3/3)

## Vitesse de Darcy totale

$$\vec{u} = -\left(M_{CO_2} + M_{H_2O}\right)\vec{\nabla}P_{CO_2} - \left(M_{CO_2}\rho_{CO_2} + M_{H_2O}\rho_{H_2O}\right)g\vec{\nabla}Z$$

## Mobilité

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{CO_2} = \frac{\overline{k}k_{rCO_2}}{\mu_{CO_2}} \\ M_{H_2O} = \frac{\overline{k}k_{rH_2O}}{\mu_{H_2O}} \end{array} \right.$$

## Transport du CO<sub>2</sub>

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \frac{q_{CO_2}}{\rho_{CO_2}} \\ \omega \frac{\partial S_{CO_2}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left( \underbrace{\left( \frac{M_{CO_2}}{M_{CO_2} + M_{H_2O}} \right)}_{\text{injection}} \vec{u} + \underbrace{\left( \frac{M_{CO_2}}{M_{CO_2} + M_{H_2O}} M_{H_2O} \right)}_{\text{gravité}} (\rho_{H_2O} - \rho_{CO_2}) g \vec{\nabla} Z \right) = \frac{q_{CO_2}}{\rho_{CO_2}} \end{array} \right.$$



# Perméabilités relatives

## CO<sub>2</sub> : Brooks-Corey

$$k_{rCO_2} = (1 - Se)^2 (1 - Se^{(2+\lambda)/\lambda})$$

## H<sub>2</sub>O : Brooks-

## Corey

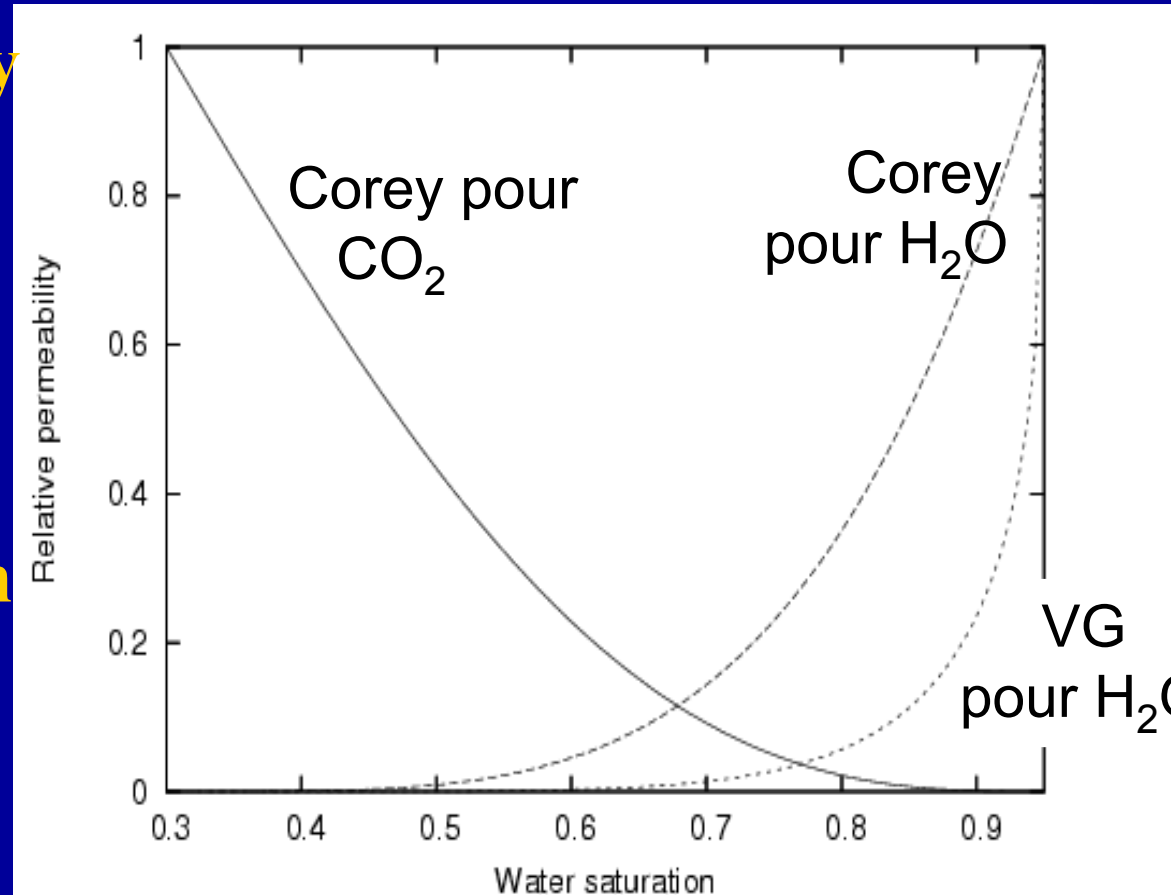
$$k_{rH_2O} = Se^{(2+3\lambda)/\lambda}$$

## ou Van Genuchten

$$k_{rH_2O} = Se^\varepsilon (1 - (1 - Se^{1/m})^m)^2$$

$$Se = \frac{S - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{rnw}}$$

$$\varepsilon = 1/2, m = 0,4 \text{ et } \lambda = 2$$



**Boucle sur le temps (TRANSI)**

**Boucle sur la pression P (BOUvit) (indice k)**

*Résolution de l'équation pour la vitesse totale*

**Boucle sur la saturation  $S_{CO_2}$  (BOUsat) (indice l)**

*Résolution de l'équation de continuité du CO2  
Calcul des mobilités*

**Convergence  
de  $S_{CO_2}$  ?**

oui

*$S_{CO_2}, f_{CO_2}, f_{H_2O}$  termes sources  
pour l'iteration  $k+1$*

**Convergence  
de  $S_{CO_2}$  ?**

oui

**Mémorisation des résultats au temps t  
et réinitialisation pour une nouvelle itération en temps**

non

non





# Discrétisation spatiale et temporelle

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{u})^{n+1,k+1} = \frac{q_{CO_2}}{\rho_{CO_2}}$$

$$\begin{aligned} & \omega \frac{(S_{CO_2})^{n+1,k+1,l+1} - (S_{CO_2})^n}{\Delta t} + \text{div} \left\{ (f_{CO_2})^{n+1,k+1,l} (\vec{u})^{n+1,k+1} \right\} \\ & = \frac{q_{CO_2}}{\rho_{CO_2}} - \text{div} \left\{ (f_{CO_2})^{n+1,k+1,l} (M_{H_2O})^{n+1,k+1,l} \left[ (\rho_{H_2O} - \rho_{CO_2}) g \vec{\nabla} z \right] \right\} \end{aligned}$$

Résolution avec Cast3M

procédure **DIVU décentrée** (d'après Ch. Le Potier)

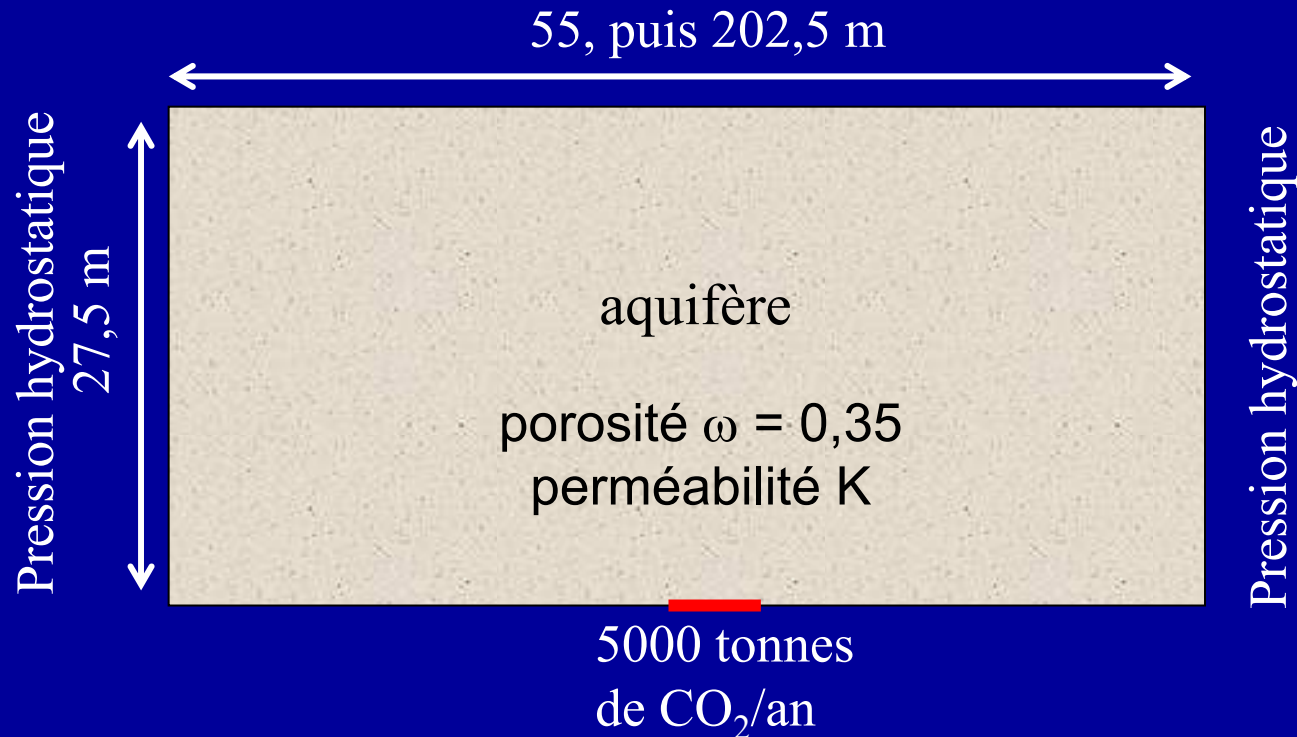


# Sommaire

- Modèle diphasique
- **Influence des perméabilités**
- Modélisation stochastique
- Conclusions et Perspectives

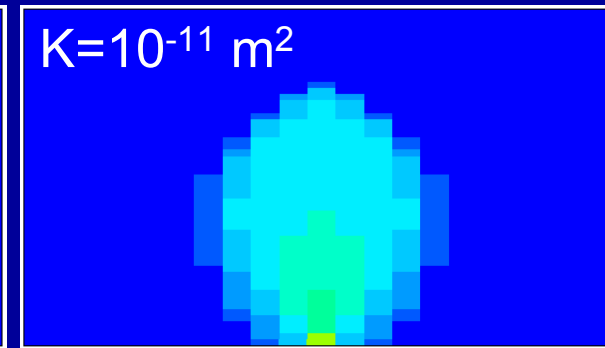
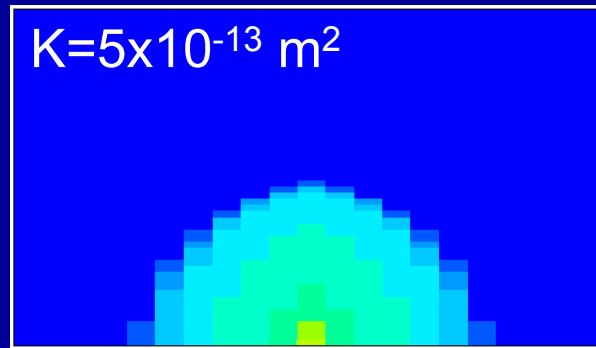
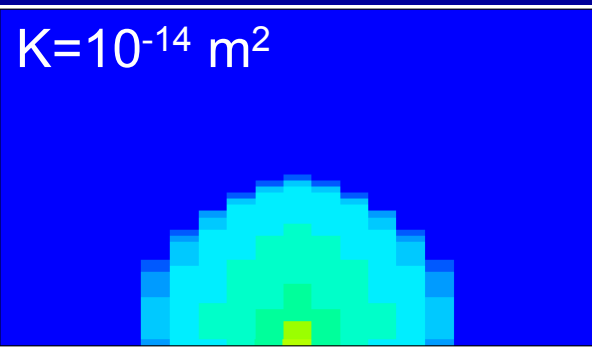


# Injection dans un aquifère : injection / pesanteur

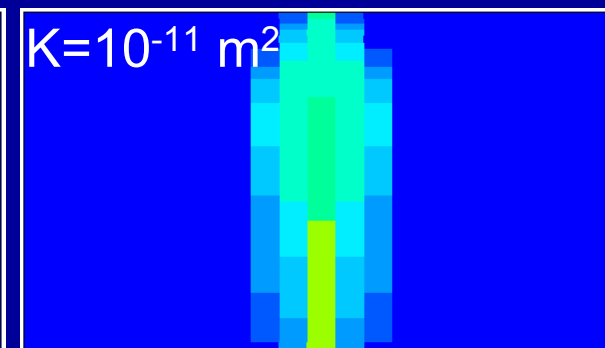
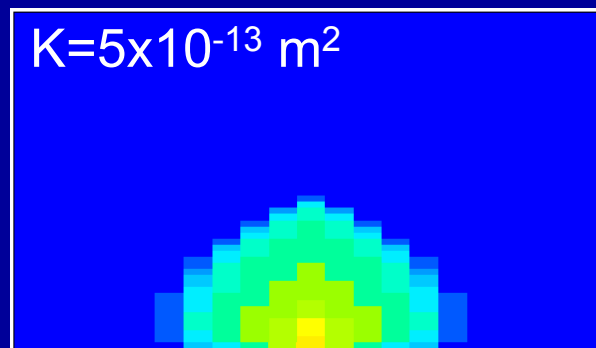
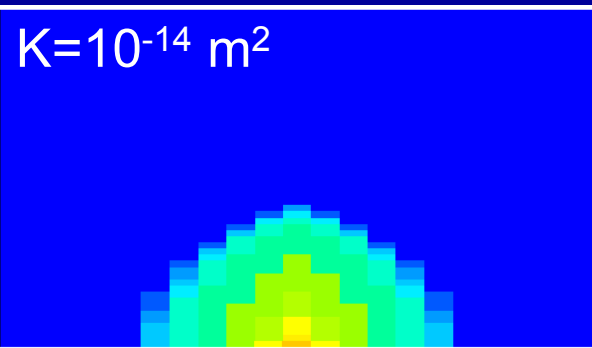


# Milieu homogène: influence de K et

1 : BC pour  $\text{CO}_2$ , VG pour  $\text{H}_2\text{O}$



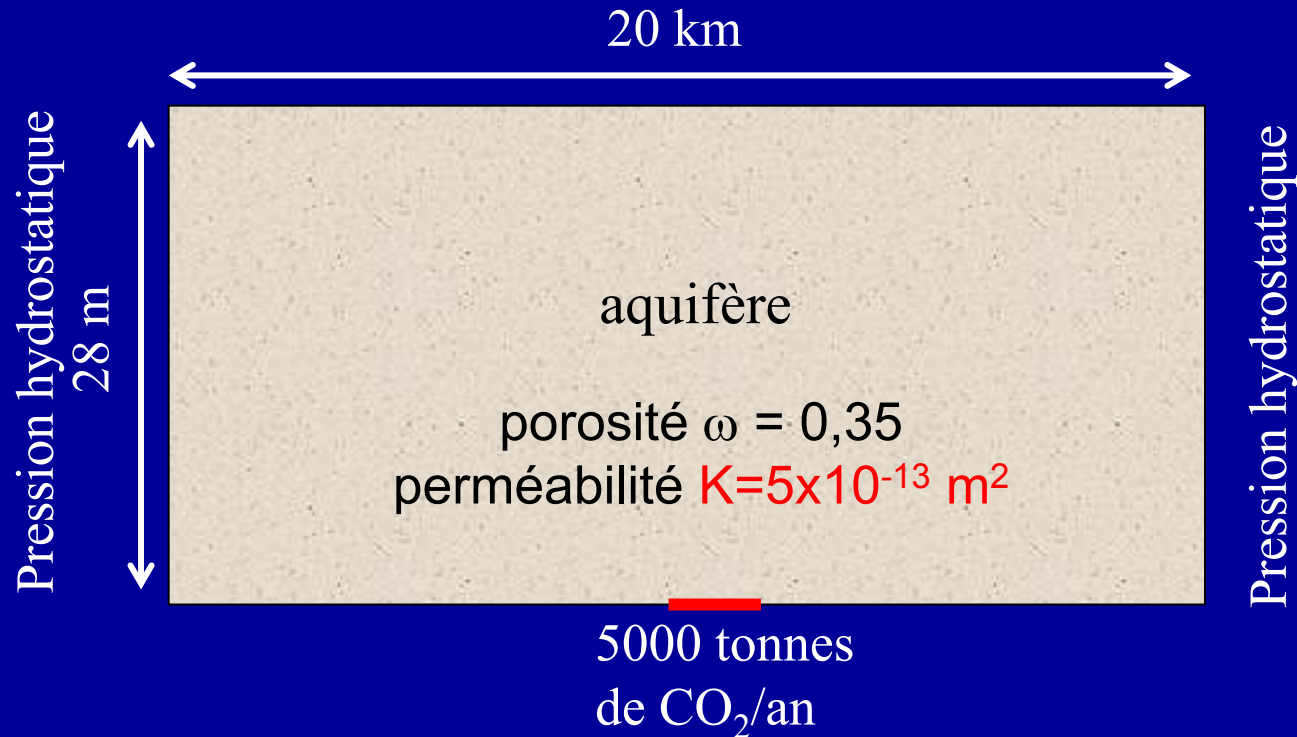
2 : BC pour  $\text{CO}_2$  et pour  $\text{H}_2\text{O}$



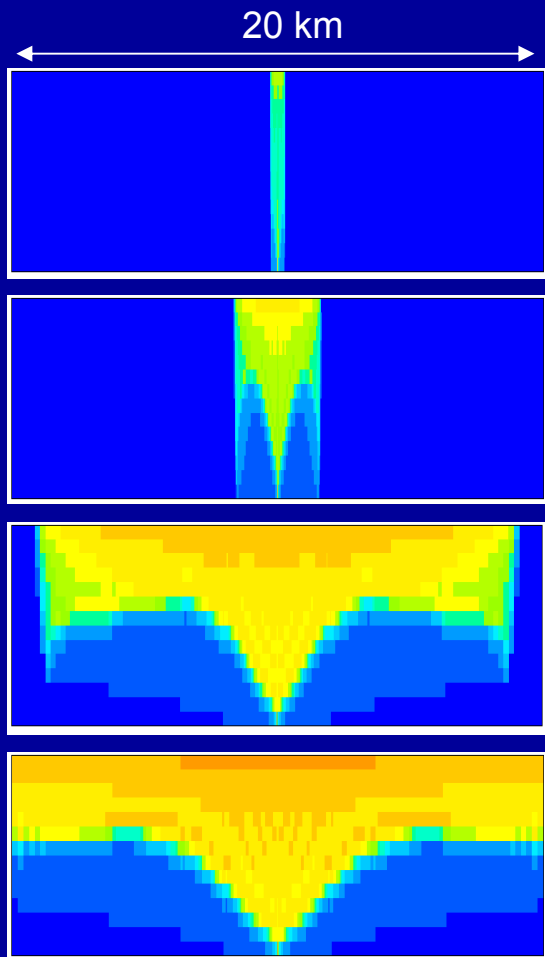
Cartes de saturation en  $\text{CO}_2$  à  $t = 1$  jour



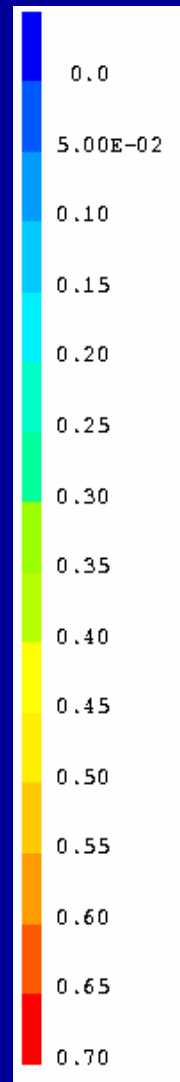
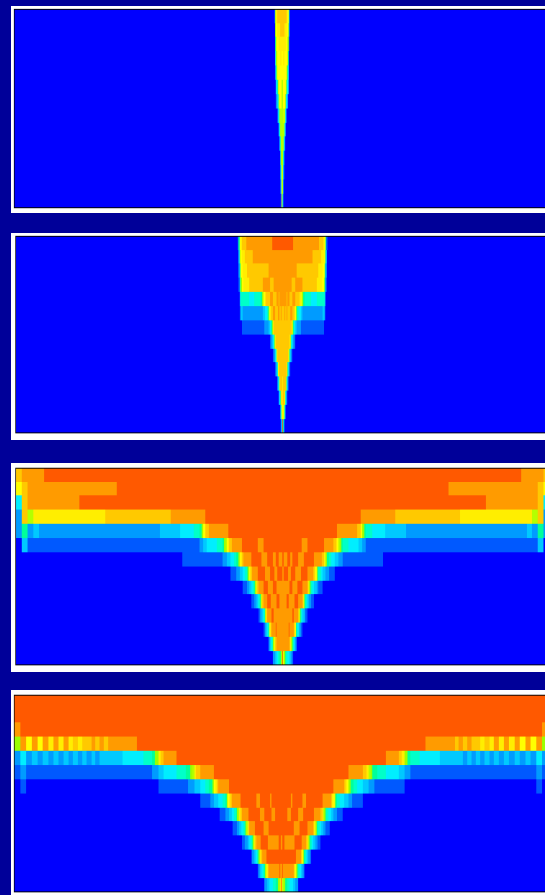
# Influence de $k_r$ aux temps plus longs



BC pour CO<sub>2</sub>  
VG pour H<sub>2</sub>O



BC pour CO<sub>2</sub>  
BC pour H<sub>2</sub>O



Cartes de saturation en CO<sub>2</sub>



# Sommaire

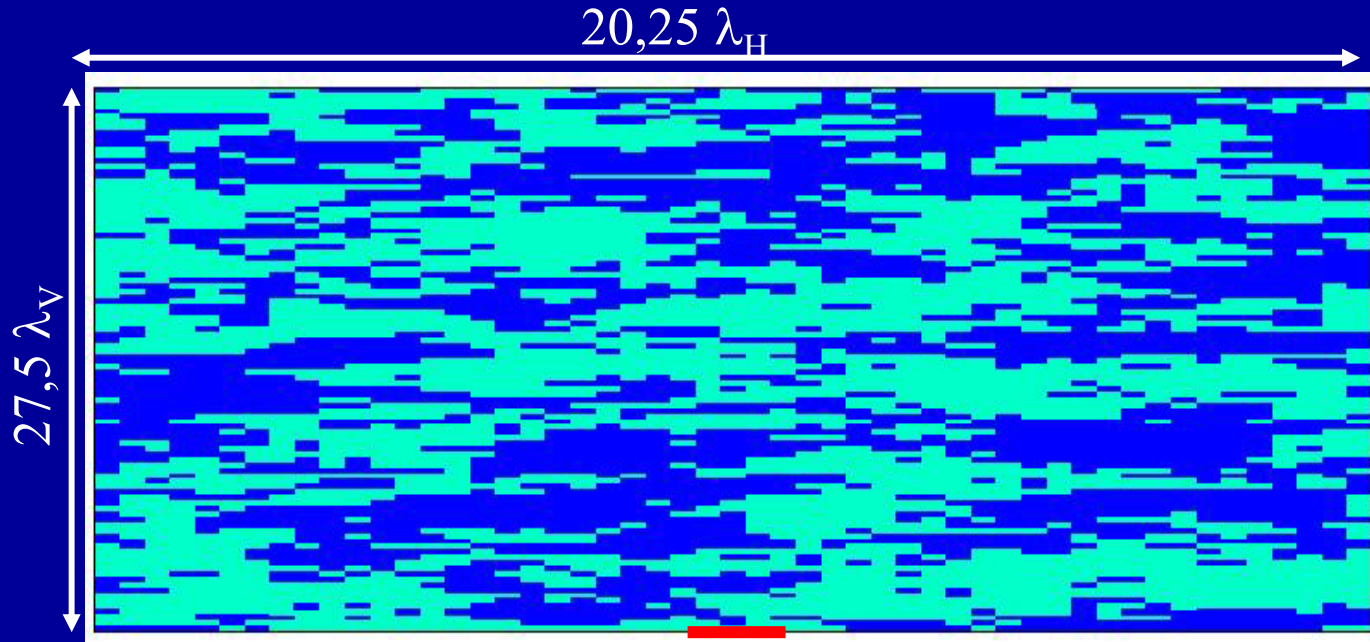
- Modèle diphasique
- Influence des perméabilités
- **Modélisation stochastique**
- Conclusions et Perspectives



# Influence de la variabilité de K

## Modélisation stochastique

$\log_{10}$ ( perméabilité intrinsèque)



injection de 5000 t/an

$$\lambda_H = 10 \text{ m} = 4 \Delta x$$

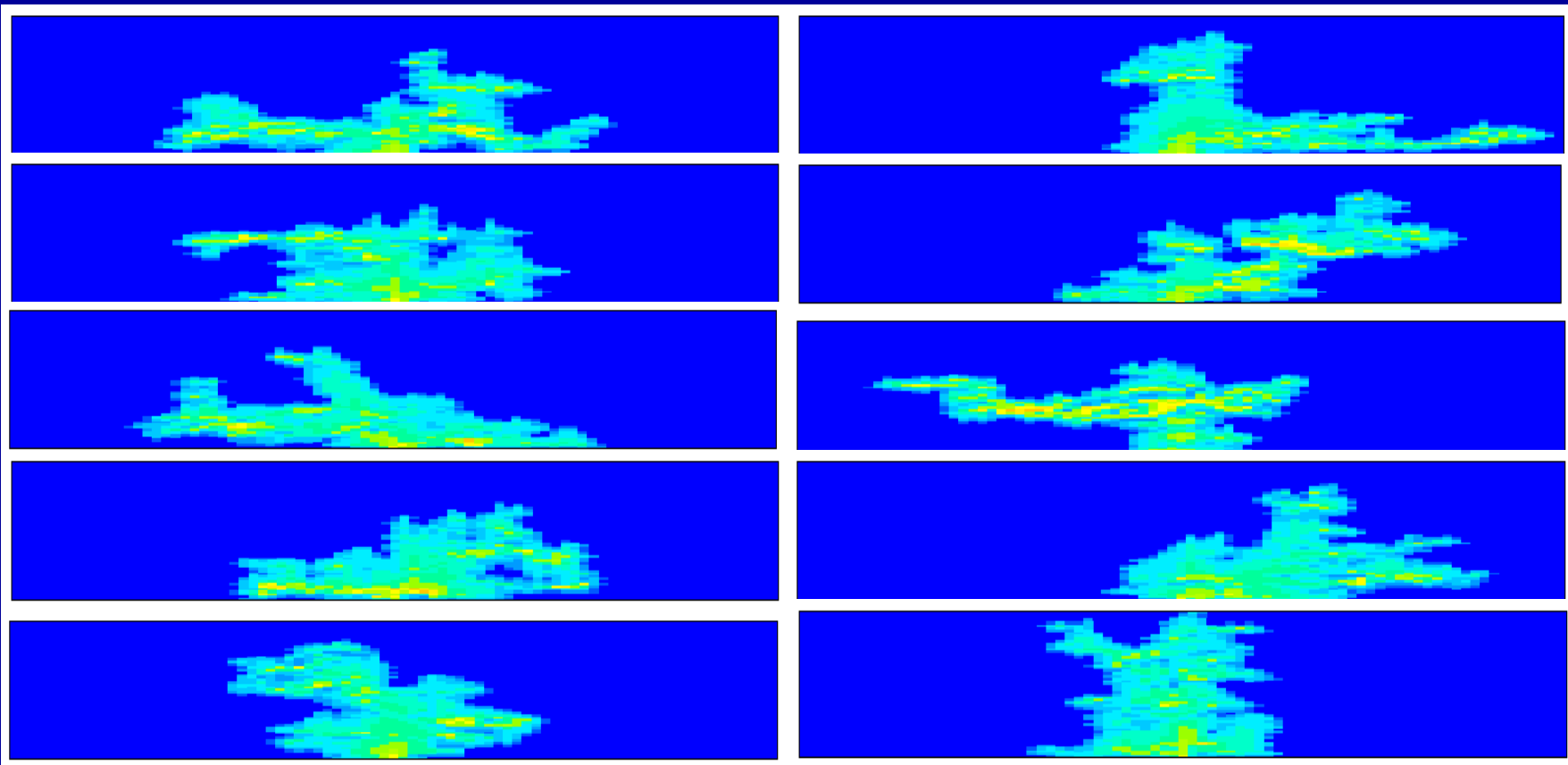
$$\lambda_V = 1 \text{ m} = 2 \Delta y$$

81 x 55 = 4455 mailles





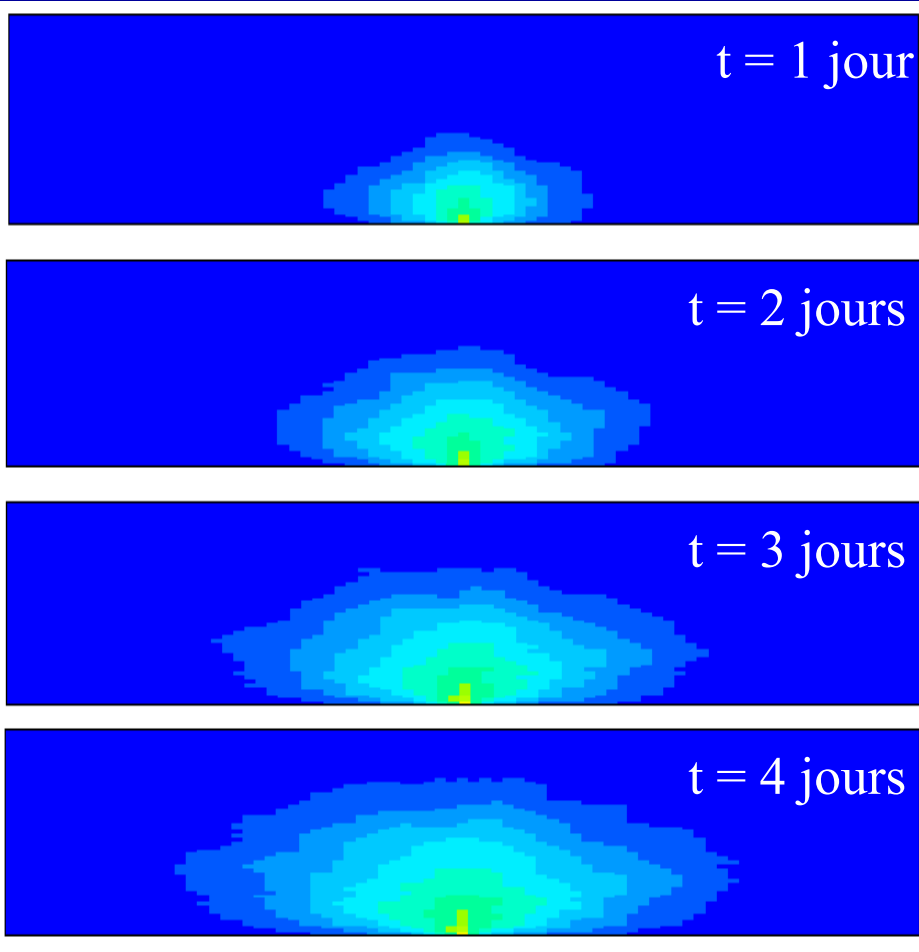
# Simulations Monte-Carlo (1/2)



Cartes de saturation en  $\text{CO}_2$  à  $t = 4$  jours  
 $\langle K \rangle = 5 \times 10^{-13} \text{ m}^2$ ,  $\sigma = 1$ ,  $\lambda_H = 10 \text{ m}$  et  
 $\lambda_V = 1 \text{ m}$



# Simulations Monte-Carlo (2/2)



Recherche d'un milieu homogène  
anisotrope équivalent :

$$K_h, K_v, D_h \text{ et } D_v$$

Moyenne des cartes de saturation en CO<sub>2</sub>



# Analyse en moments (1/2)

Moment d'ordre 0 :

~ masse totale de CO<sub>2</sub>

$$M_0(t) = \int_{\Omega} S(x, y, t) dx dy$$

Moment d'ordre 1 :

~ position du centre de masse

$$M_1^{xi}(t) = \frac{\int_{\Omega} S(x, y, t) x_i dx dy}{\int_{\Omega} S(x, y, t) dx dy}$$

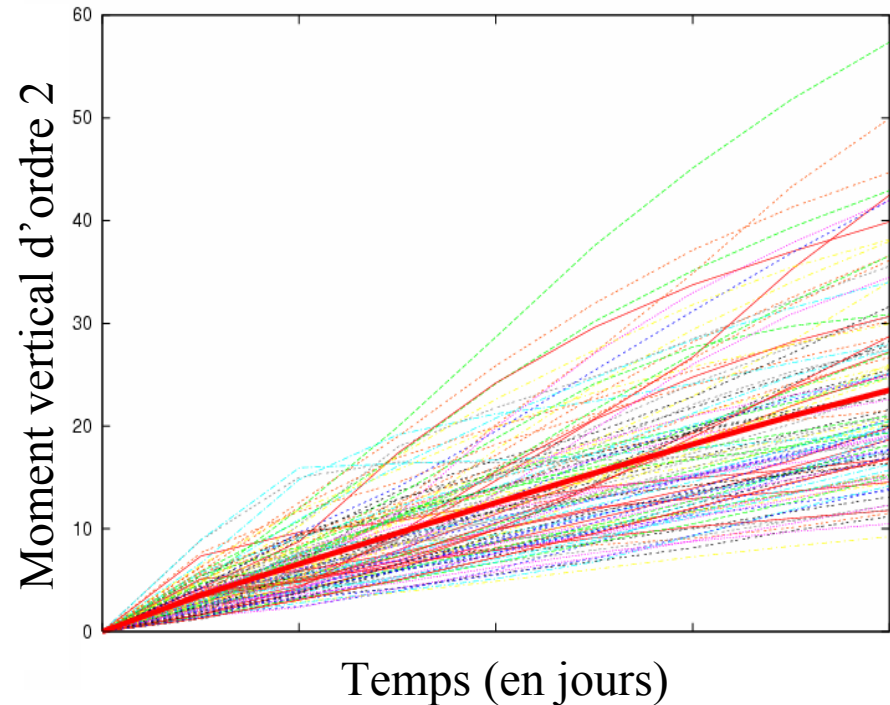
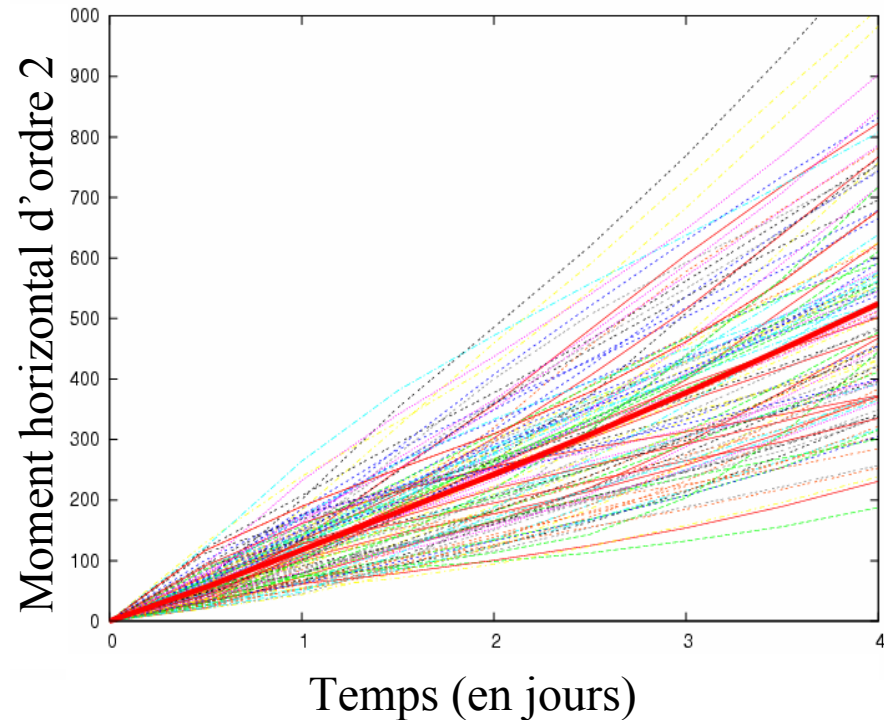
Moment d'ordre 2 :

~ étalement de la bulle

$$M_2^{xixj}(t) = \frac{\int_{\Omega} S(x, y, t) x_i x_j dx dy}{\int_{\Omega} S(x, y, t) dx dy}$$



# Analyse en moments (2/2)

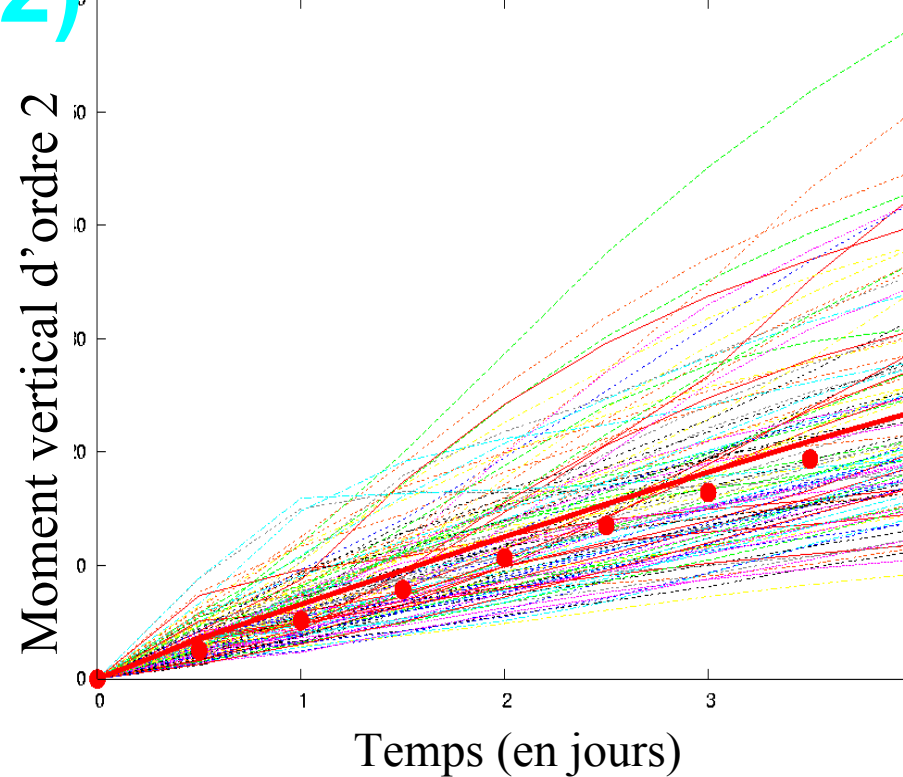
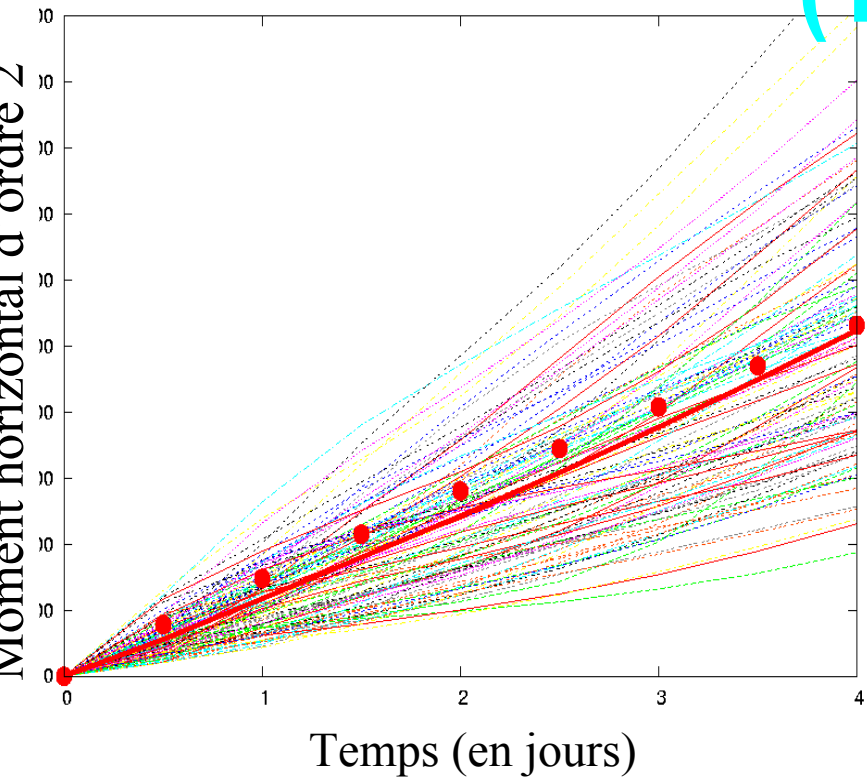


Moments spatiaux d'ordre 2, centrés



# Milieu homogène équivalent

(1/2)



*Caractéristiques du milieu homogène anisotrope équivalent :*

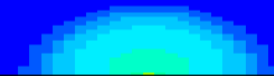
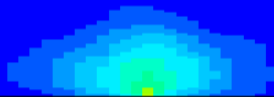
$$K_h = 20 \times \langle K \rangle = 10^{-11} \text{ m}^2 \quad \text{et} \quad K_v = 0,1 \times K_h = 10^{-12} \text{ m}^2$$

$$D_h = 2 \times 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \quad \text{et} \quad D_v = 0,1 \times D_h = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

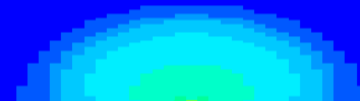
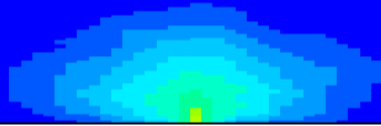


# Milieu homogène équivalent

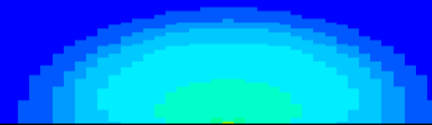
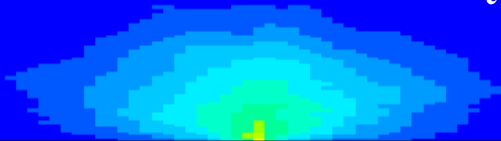
t = 1 jour (2/2)



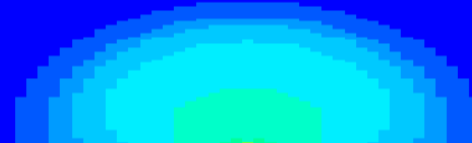
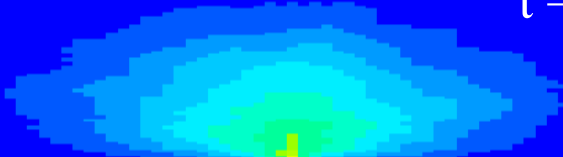
t = 2 jours



t = 3 jours



t = 4 jours



Cartes de saturation en CO<sub>2</sub>



# Conclusions et Perspectives

- Développement et validation de l'**outil numérique**
- Importance des **perméabilités**
- Influence des **hétérogénéités** => **dispersion**  
Modélisation stochastique et simulations  
Monte-Carlo => paramètres équivalents
- Approche théorique



# Problèmes rencontrés

- **Décentrement** avec fonction quelconque
- **Convergence** délicate, critère très petit
  - $\text{prec} = 5 \times 10^{-4}$ , voire  $5 \times 10^{-5}$
- **Temps de calculs** très longs
  - $L_x \times L_y = 202,5 \times 27,5 \text{ m}^2$  avec  $81 \times 55 = 4455$  mailles
  - $T_{\text{final}} = 7,5 \text{ j}$ , avec  $\Delta t \sim 100 \text{ s}$ .
  - 4 à 5h sans dissolution, 1 à 2 j avec dissolution
- **Problèmes Cast3M:** MENAGE, « GEMAT ERROR »

