Développement d'un code multiphasique multiconstituants

Raphaël di Chiara[(1)],**Gerhard Schäfer**[(1)], **Philippe Ackerer**[(1)], **Jean-Marie Côme**[(2)] , **Michel Quintard**[(3)], **Guy Chavent**[(4,5)]

[(1)]*Université de Strasbourg, Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg, 1 rue Blessig 67084 Strasbourg*
[(2)]*BURGEAP, Direction R&D, 19, rue de la Villette, 69425 Lyon*
[(3)]*Université de Toulouse, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Allée du Professeur C. Soula, 31400 Toulouse*
[(4)]*Ceremade, Université Paris-Dauphine,* [(5)]*INRIA-Rocquencourt*
email:{dichiara,schafer}@unistra.fr

Contexte

- Programme "code complet" co-financé par l'ADEME.
- Evaluation du devenir des composés organochlorés aliphatiques (COCA) dans le milieu souterrain.
- Partenaires : BURGÉAP, LHyGeS et l'IMFT.
- Développement d'un code de calcul multiphasique multiconstituants avec dissolution, non équilibre local, biodégradation

1. Reformulation du modèle d'écoulement en pression globale

Pour chaque phase j composant un diagrame ternaire $\mathbb{T}$, (1) eau, (2) huile et (3) gaz, la formulation fractionnelle de l'écoulement (sans terme puit-source) en pression globale :

$$\phi\partial_t \sum_{j=1}^{3} B_j(P_j)S_j) + \nabla.(\boldsymbol{q}_t) = 0,$$

avec $\boldsymbol{q}$ le *vecteur flux volumique total* :

$$\boldsymbol{q} = -\overline{\overline{K}}d\left[(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p})\nabla P - \rho g \nabla Z\right]$$

et deux équations de saturation en eau et gaz ($j = 1, 3$) :

$$\phi\partial_t(B_jS_j) + \nabla.(\boldsymbol{q}_j) = 0$$

avec

$$\boldsymbol{q}_j = \nu_j\boldsymbol{q}_t - d\nu_j\overline{\overline{K}}\nabla(Pc^{j2} - P_c^g) +$$
$$\boldsymbol{g}\left[G_j + \bar{\rho}\frac{\partial P_c^g}{\partial p}\left(1 - \frac{\partial P_c^g}{\partial p}\right)^{-1}\right]$$

La nouvelle approche en *pression globale* permet :

- d'éliminer les gradients de pression capillaire dans l'expression de $\boldsymbol{q}$
- P et $\boldsymbol{q}$ suivent une loi de type Darcy $\rightarrow$ régularité sur la variables primaire P

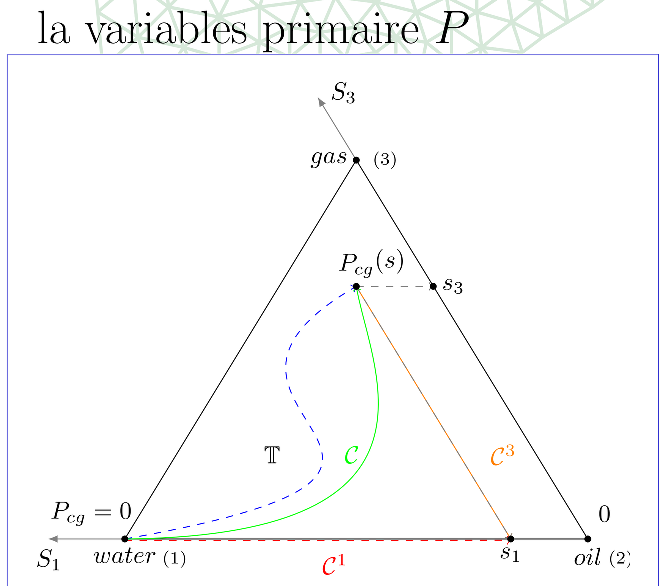


Diagramme ternaire $\mathbb{T}$, constructions de P_c^g

Le nouveau champ de pression globale $P = P_2 + P_c^g(S, P)$ fonction de P_2 (pression en huile) et de la *pression capillaire globale*. Différentes courbes $\mathcal{C}$ permettent de construire P_c^g. Nous avons retenu $\mathcal{C}^1$ et $\mathcal{C}^3$.

Cette nouvelle formulation sur P doit satisfaire deux règles (condition TDC) :

- Une condition de *différentielle totale* sur P_c^g
- Une condition de *stabilité* $\left|\frac{\partial P_c^g}{\partial p}(s, p)\right| < 1$

2. Schémas numériques appliqués à l'écoulement

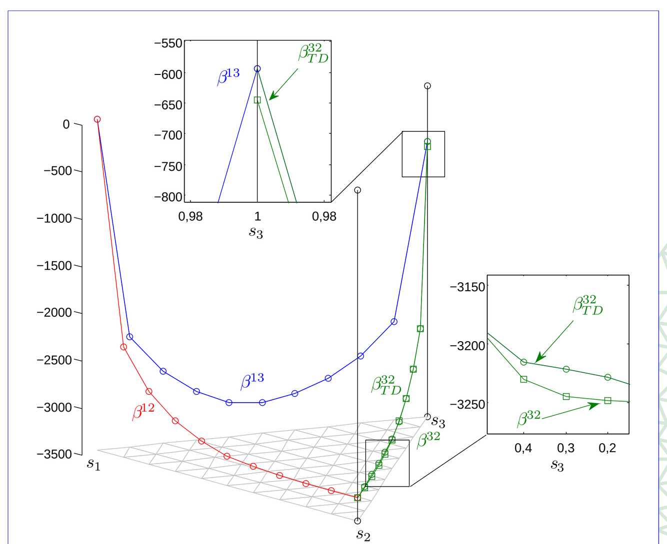
Schéma IMPES avec "Operator splitting". Schéma explicite d'ordre 2 en temps (sous condition de CFL).

- Eléments finis Mixtes Hybrides $\rightarrow$ pression globale, termes de diffusion (saturations).
- Eléments finis discontinus $\rightarrow$ termes d'advection (saturations). Reconstruction des saturations par limitation de pente, *L-projection*.

3. Interpolation des données triphasiques sur $\mathbb{T}$

Données requises : p, kr_k^{ij} pour $k = i, j$, $P_c^{12}(s_1)$, $P_c^{32}(s_3)$, (modèle capillaire de Van-Genuchten : sable H1F), équation d'état (loi des gaz parfaits) :

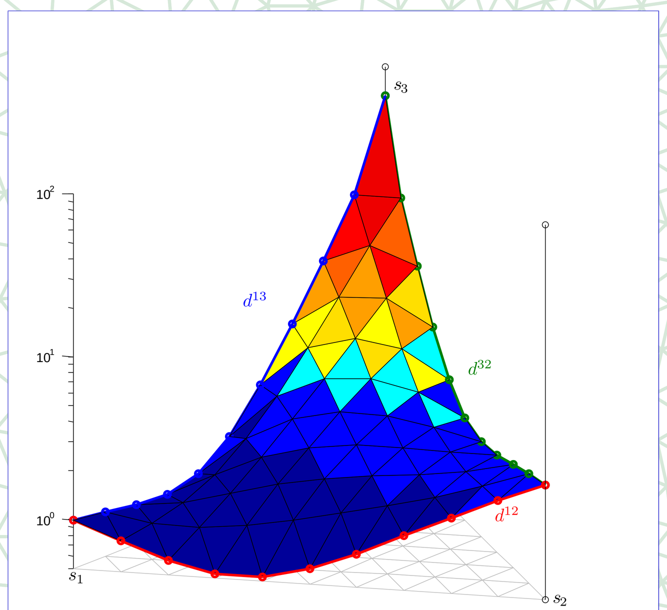
- ***Etape 1&2 :*** Résoudre trois équations différentielles ordinaires non linéaires en P_c^g sur $\partial\mathbb{T}$ (frontières)



P_c^g [Pa] sur $\partial\mathbb{T}$

Construction sur $\partial\mathbb{T}$ (systèmes diphasiques) de P_c^g notée β^{ij}. Intégration avec un schéma prédicteur-correcteur ABM4 multi-pas. Condition de *compatibilité* au sommet en gaz $\beta^{13} = \beta_{TD}^{32}$ (étape 2).

- ***Etape 3&4 :*** Calcul de d sur $\partial\mathbb{T}$ et résoudre $-\Delta d = 0$ sur $\mathbb{T}$

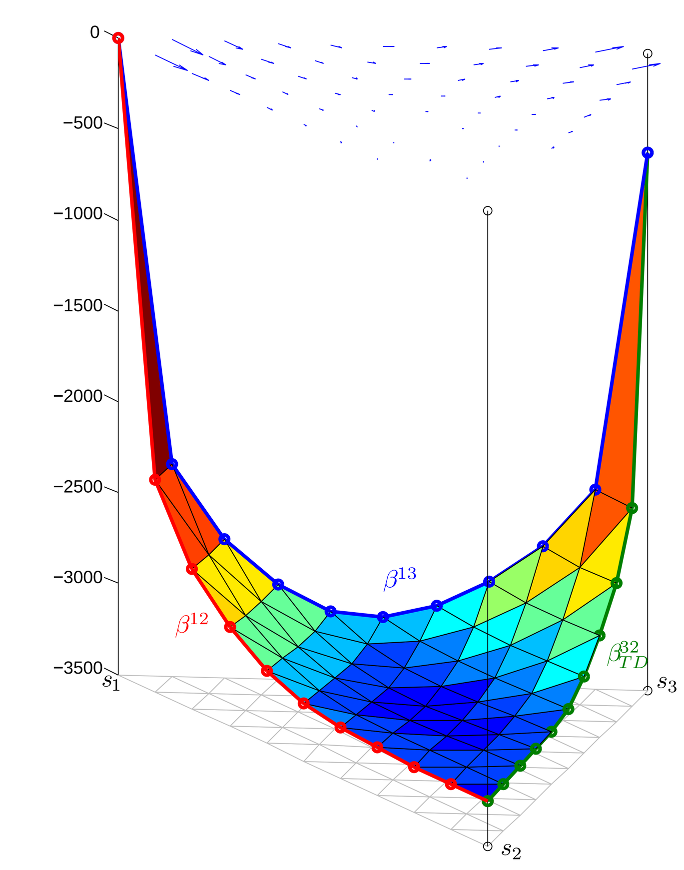


d [Pa.s]$^{-1}$ sur $\mathbb{T}$

Mobilité globale d résolue sur $\mathbb{T}$. Approche du problème harmonique par éléments finis standards C^0 à partir des valeurs de mobilités obtenues sur $\partial\mathbb{T}$ i.e. d^{12} (eau/huile) d^{32} (gaz/huile) et d^{13} (eau/gaz).

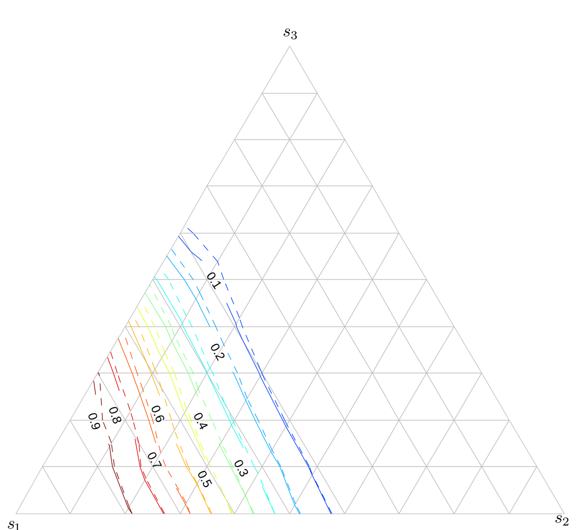
- ***Etape 5&6 :*** Résolution du problème biharmonique $\Delta^2 P_c^g = 0$ sur $\mathbb{T}$

Pression capillaire globale P_c^g résolue sur $\mathbb{T}$. Approche du problème biharmonique par éléments finis composite C^1 de*Hsieh-Clough-Tocher* (étape 5) et du facteur de compressibilité $\partial P_c^g/\partial p$. Condition TDC vérifiée sur $\mathbb{T}$. Calcul des flux fractionnaires avec $\partial P_c^g/\partial s_j$.

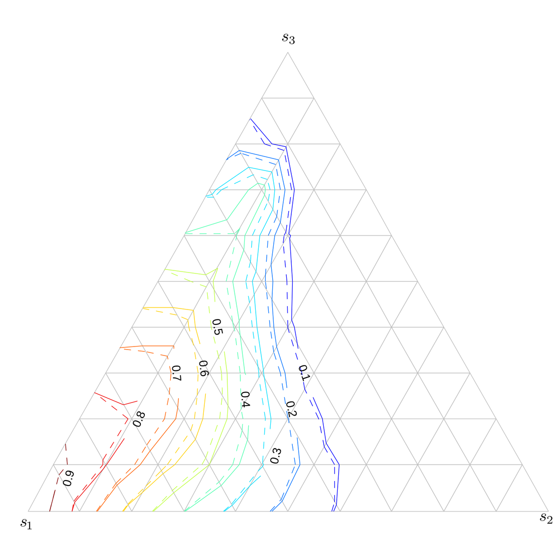


P_c^g [Pa] sur $\mathbb{T}$

Flux fractionnaires ν_i et perméabilités kr_i issues des étapes 5&6 (*cas incompressible (pleins), cas compressible (pointillés)*) :

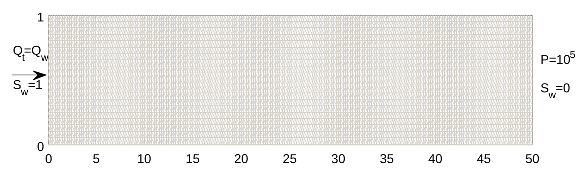


Flux fractionnaire ν_1

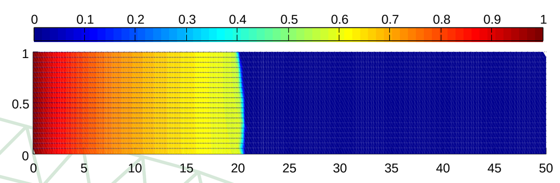


Perméabilité kr_1

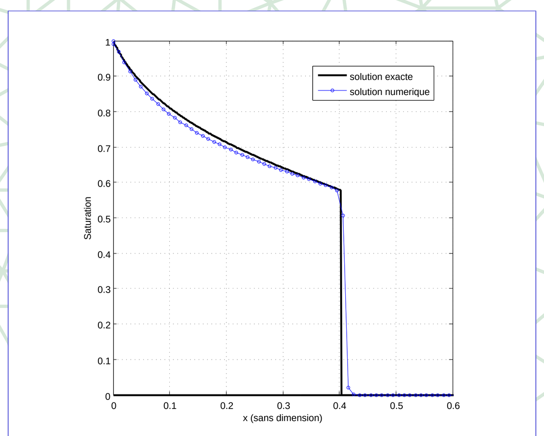
4. Ecoulement unidirectionnel de Buckley-Leverett



Conditions aux limites



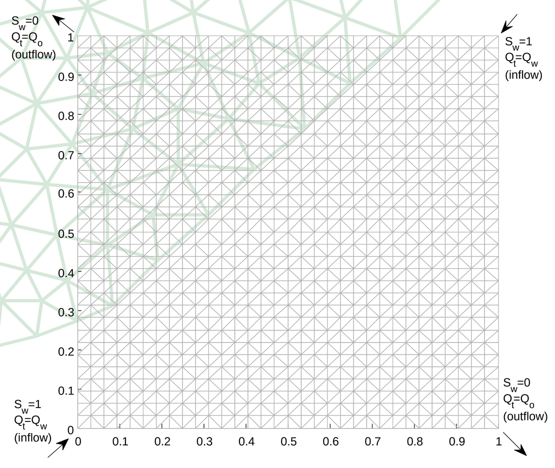
Champ de saturation en eau $t = 10000$ sec.



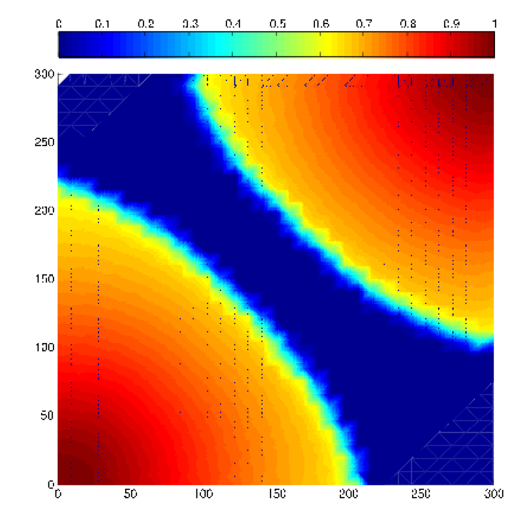
Profil de saturation en eau ($y = 0.5$)

Injection d'eau dans un milieu initialement saturé en TCE ($S_1 = 0$).
Le flux entrant d'eau $Q_t = Q_1 = 25\,m/j$ est imposé sur la frontière $x = 0$ et la saturation en eau est $S_1 = 1$.
Le modèle de perméabilité de Todd est utilisé sans effet de gravité et sans compressibilité. Le tenseur de perméabilité intinsèque est isotrope $K = 10^{-7}$ et la porosité $\phi = 0.2$.
La solution analytique de Buckley-Leverett est bien reproduite.

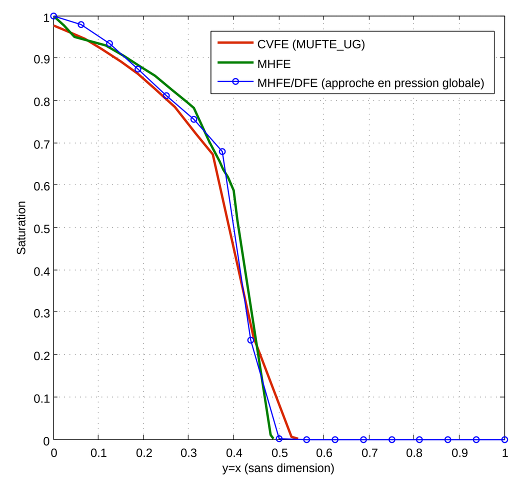
5. Ecoulement radial de Buckley-Leverett



Conditions aux limites



Champ de saturation $t = 200\,j$



Profil de saturation

Double injection d'eau dans un milieu initialement saturé en TCE ($S_1 = 0$).
Flux entrant d'eau $Q_t = Q_1 = 12\,kg/j$ imposé sur le coin ($x = 0, y = 0$), et le coin ($x = 300\,m, y = 300\,m$). Saturation en eau imposée $S_1 = 1$.
Le modèle de perméabilité de Todd est utilisé sans effet de gravité et sans compressibilité. Le tenseur de perméabilité intinsèque est isotrope $K = 10^{-7}$ et la porosité $\phi = 0.2$.
La Solution obtenue est symétrique, le flux total est nul sur la diagonale $y = -x$.
La solution obtenue (trait bleu) est comparée avec une approche en Volumes Finis (*Control Volum Finite Element*, code MUFTE_UG) et une approche par élément finis mixtes.

Conclusions et travail en cours

– *Fonctionnalités*
- Linéarisation de Picard (couplage pression/saturation)
- Gravité prise en compte, bilan de masse $\sim 1\%$

– *Perspectives*
- Ecoulement en milieu hétérogène
- Transport multiconstituants, dissolution, non équilibre local et bioégradation

Remerciements : Ce travail a été co-financé et soutenu par l'ADEME et BURGÉAP.