



HAL
open science

Mise à l'échelle d'un écoulement diphasique avec gravité dans un milieu géologique hétérogène : application au cas de la séquestration du CO

Tri Dat Ngo

► To cite this version:

Tri Dat Ngo. Mise à l'échelle d'un écoulement diphasique avec gravité dans un milieu géologique hétérogène : application au cas de la séquestration du CO . Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Paris Saclay (COMUE), 2016. Français. NNT : 2016SACLS005 . tel-01290689

HAL Id: tel-01290689

<https://theses.hal.science/tel-01290689>

Submitted on 18 Mar 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

NNT : 2016SACLS005

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉ À
L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ECOLE DOCTORALE N°579

Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

Spécialité de doctorat : Mécanique des fluides

Par

Tri Dat NGO

**Mise à l'échelle d'un modèle d'écoulement diphasique
avec gravité dans un milieu géologique hétérogène :
Application au cas de la séquestration du CO₂**

Thèse présentée et soutenue à Gif-sur-Yvette, le 26 Janvier 2016

Composition du jury :

M. Vincent LAGNEAU	Professeur, Ecole des Mines ParisTech	<i>Président du jury</i>
M. Roland MASSON	Professeur, Université de Nice Sophia Antipolis	<i>Rapporteur</i>
M. Benoît NOETINGER	Directeur Expert, IFPEN	<i>Rapporteur</i>
M. Harold AURADOU	Directeur de Recherche, FAST, Université Paris-Sud	<i>Examineur</i>
M. Andro MIKELIC	Professeur, Université Claude Bernard Lyon 1	<i>Examineur</i>
M. Emmanuel MOUCHE	Ingénieur (DR), LSCE-CEA	<i>Directeur de thèse</i>
M. Pascal AUDIGANE	Ingénieur, BRGM	<i>Co-directeur de thèse</i>

Remerciements

Je voudrais profiter de ces deux pages de nature un peu « moins scientifique » pour exprimer toute ma gratitude aux personnes sans qui cette thèse n'aurait pas été bien terminée.

Mes premiers remerciements s'adressent à mes deux encadrants : M. Emmanuel Mouche et M. Pascal Audigane. J'ai constaté moi-même, à travers les discussions avec eux, leur expérience et la clairvoyance grâce auxquelles ils m'ont bien guidé au fil de ces trois années. Je suis gré à Emmanuel pour la grande charge de travail qu'il a gérée en jouant un double rôle, mon directeur de thèse et mon enseignant de la langue française. Merci pour son humour, sa générosité et sa disponibilité, particulièrement pendant la période de « rédaction-corrrection » de ma thèse, malgré sa douleur au dos. Je souhaite remercier Pascal pour sa gentillesse et son chaleureux accueil dans le cadre de mes courts séjours au BRGM.

Je suis très honoré que M. Roland Masson et M. Benoît Noetinger aient accepté d'être rapporteur de cette thèse. Leurs commentaires et remarques m'ont donné une vision globale sur ce sujet. Je voudrais donc leur adresser mes vifs remerciements.

Je tiens à remercier M. Vincent Lagneau pour l'honneur qu'il me fait de présider mon jury de thèse, mais aussi pour l'intérêt qu'il a porté à l'avancement de mes travaux depuis le début de ma thèse. Je manifeste également ma profonde gratitude à Messieurs Harold Auradou et Andro Mikelic qui ont bien voulu faire partie de ce jury.

Maintenant, un grand merci à toutes les personnes du laboratoire LSCE-CEA Saclay grâce à qui cette thèse a pu se dérouler dans d'excellentes conditions, en particulier, les représentants de l'équipe de modélisation hydraulique (HYDRO) : Claude Mugler et Christophe Grenier. Je suis très reconnaissant à Claude pour l'aide précieuse qu'elle m'a donnée en corrigeant ce manuscrit.

Mes meilleures pensées vont ensuite vers tous les doctorants, post-doctorants et stagiaires de l'équipe HYDRO dont j'ai le plaisir de faire leur connaissance : Marie-Alice Harel, Nicolas Roux, Sandro Rinaldi, Mathilde Maquin, Arnaud Rakotondrasoa, Cécile Carrère et Quentin Chanzy.

A few words in English in order to thank Bernd Flemish and other colleagues from University of Stuttgart for useful discussions about DuMu^x by email and throughout my second visit to Stuttgart at the DuMu^x User Meeting in June 2015. Beside high scientific quality, there are three things that made me fall in love with this meeting : (i) the beauty of the city ; (ii) the kindness of the Stuttgart people, and particularly (iii) the diner at the Beer Garden.

Que serait la vie sans de vrais amis ! Je saisis cette occasion pour exprimer toute ma reconnaissance à mes camarades de la classe 51XF de l'ENSGC de Hanoï. Certains d'entre eux sont également venus en France il y a cinq ans et ont partagé avec moi la nostalgie, les difficultés comme les réussites. Merci également mes coéquipiers dans l'équipe Gio-Lao, avec qui j'ai partagé tant de grands moments, voire versé quelques larmes, sur le terrain de foot. Je ne donne pas ici le nom mais vous savez mieux que moi de qui je parle.

Je ne pourrais pas terminer ces remerciements sans me tourner vers ma famille. Merci mes parents et mon aîné frère au Viet Nam, pour tout l'amour que vous m'offrez. Je vous remercie de m'avoir permis de faire des études dans les meilleures conditions et de m'avoir supporté de commencer mon aventure à l'étranger.

Ma profonde gratitude est adressée à ma femme, Thuy An, qui a pris le relais dès mon arrivée en France. Merci d'avoir partagé M. Tri Dat NGO avec l'écran noir de Putty quand je travaillais chez nous. Merci d'être toujours jolie dans mes yeux et pour ton soutien permanent et inconditionnel.

Finalement, je dédie cette thèse à mon copain, que je considère comme un frère, Truong Giang Pham. Son courage et son optimisme face à la maladie, m'a donné tellement de motivation, d'énergie ainsi que de confiance pour surmonter les difficultés rencontrées, non seulement au cours de cette thèse mais aussi dans ma vie!

Quelques pages ne suffisent jamais et l'essentiel était là. Néanmoins, les lignes blanches suivantes de cette page seront éventuellement remplies à la main au cas où j'ai oublié quelqu'un d'autre . . .

*À ma femme Thúy An, mon frère et mes parents !
I can run this so far because you tie my shoelaces.*

Résumé

Ce travail de thèse porte sur la modélisation mathématique et la simulation numérique de la migration par gravité et capillarité du CO_2 supercritique injecté dans un site de séquestration géologique hétérogène. Les simulations sont réalisées à l'aide du code DuMu^x. Particulièrement, on s'intéresse à la mise à l'échelle, de l'échelle de la cellule à l'échelle du réservoir, d'un modèle d'écoulement diphasique CO_2 -saumure, au sein d'un milieu stratifié périodique constitué d'un réseau de barrières peu perméables horizontales, continues ou discontinues. La mise à l'échelle est effectuée par la méthode asymptotique à double échelle. Dans un premier temps, on considère le cas d'une colonne verticale parfaitement stratifiée. Un modèle homogénéisé est développé puis validé par simulation numérique pour différentes valeurs du nombre capillaire et du flux incident de CO_2 . La méthode d'homogénéisation est appliquée au cas d'un écoulement dans un milieu bidimensionnel constitué de strates discontinues. Par l'effet de gravité, le CO_2 s'accumule sous les strates peu perméables, ce qui conduit à un problème mathématique local non standard. Cette stratification est modélisée à l'aide de l'approche des courants de gravité. L'approche est étendue au cas des strates semi-perméables et en prenant en compte la capillarité. Le modèle mis à l'échelle est comparé à des simulations numériques effectuées pour différents types de strates, avec ou sans pression capillaire, et sa limite de validité est discutée pour chacun de ces cas. La dernière partie de la thèse est dédiée à l'étude des performances du code DuMu^x pour simuler par calcul parallèle l'injection et la migration de CO_2 dans des milieux hétérogènes tridimensionnels (milieu périodique stratifié, milieu fluvatile et milieu réservoir SPE10).

Mots-clés: Stockage géologique de CO_2 , écoulement diphasique avec gravité, milieu hétérogène, mise à l'échelle, homogénéisation asymptotique multi-échelle, courant de gravité.

Abstract

This work deals with the mathematical modeling and the numerical simulation of the migration under gravity and capillarity effects of the supercritical CO₂ injected into a geological heterogeneous sequestration site. The simulations are performed with the code DuMu^x. Particularly, we consider the upscaling, from the cell scale to the reservoir scale, of a two-phase (CO₂-brine) flow model within a periodic stratified medium made up of horizontal low permeability barriers, continuous or discontinuous. The upscaling is done by the two-scale asymptotic method. First, we consider perfectly layered media. An homogenized model is developed and validated by numerical simulation for different values of capillary number and the incident flux of CO₂. The homogenization method is then applied to the case of a two-dimensional medium made up of discontinuous layers. Due to the gravity effect, the CO₂ accumulates under the low permeability layers, which leads to a non-standard local mathematical problem. This stratification is modeled using the gravity current approach. This approach is then extended to the case of semi-permeable stratas taking into account the capillarity. The upscaled model is compared with numerical simulations for different types of layers, with or without capillary pressure, and its limit of validity is discussed in each of these cases. The final part of this thesis is devoted to the study of the parallel computing performances of the code DuMu^x to simulate the injection and migration of CO₂ in three-dimensional heterogeneous media (layered periodic media, fluvial media and reservoir model SPE 10).

Keywords: Geological storage of CO₂, two-phase flow including gravity, heterogeneous media, upscaling, multi-scale asymptotic homogenization, gravity current.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Séquestration géologique du CO ₂	2
1.2	Principe du stockage	4
1.3	Objectif de la thèse	4
1.4	Plan du manuscrit	6
	Bibliographie	9
2	Upscaling of CO₂ vertical migration through a periodically layered media	13
2.1	Introduction	14
2.2	Two-phase incompressible, immiscible flow model	16
2.2.1	Mathematical formulation	16
2.2.2	Dimensionless equations	18
2.3	Upscaled model	19
2.3.1	Capillary-dominant case : $N_c \approx \mathcal{O}(1)$	21
2.3.2	Balance case : $N_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$	25
2.3.2.1	Effective flux function	25
2.3.2.2	Numerical implementation	26
2.4	Validation of upscaled models	27
2.4.1	Capillary-dominant case	28
2.4.2	Balance case	30
2.5	Summary and conclusions	34
	Bibliographie	36
3	Buoyant flow of CO₂ through a semi-permeable layer of finite extent	39
3.1	Introduction	40
3.2	Two-phase incompressible, immiscible flow model	41
3.3	One-dimensional piecewise homogeneous porous medium	43
3.3.1	Interface continuity conditions	44
3.3.2	Flow from k^- to k^+	48
3.3.3	Flow from k^+ to k^-	49
3.4	Single horizontal layer of finite extent	52
3.4.1	Gravity current model	53
3.4.2	Capillary-free case	56
3.4.2.1	Maximum inflow flux	57
3.4.2.2	Impact of total velocity fluctuations	60
3.4.3	Gravity-dominant flow	62
3.5	Conclusion	65

3.6	Appendix - Steady state gravity current under semi-permeable barrier fed by an an uniformly distributed source term for the capillary-free case . . .	67
3.7	Application of gravity current model in the 1D case	68
	Bibliographie	70
4	Mise à l'échelle de la migration de CO₂ dans un système hétérogène périodique	73
4.1	Contexte et système étudié	74
4.2	Détermination du flux gravitaire maximal	75
4.2.1	Modèle de milieu stratifié équivalent	75
4.2.2	Analyse du flux maximal	76
4.2.2.1	Inclusions imperméables	76
4.2.2.2	Inclusions semi-perméables	77
4.2.3	Validation par simulation numérique de l'hypothèse du flux maximal	77
4.2.3.1	Cas 3a : Inclusion imperméable	79
4.2.3.2	Cas 3b : Inclusion semi-perméable	80
4.3	Développement asymptotique à double échelle	83
4.3.1	Problème de l'écoulement	86
4.3.2	Problème du transport	87
4.4	Flux total mis à l'échelle	90
4.4.1	Inclusions imperméables - sans capillarité ($\mathbf{k}^i = \mathbf{0}, \mathbf{p}_c = \mathbf{0}$)	90
4.4.2	Inclusions perméables - sans capillarité ($\mathbf{k}^i \neq \mathbf{0}, \mathbf{p}_c = \mathbf{0}$)	96
4.4.3	Inclusions imperméables - avec capillarité ($\mathbf{k}^i = \mathbf{0}, \mathbf{p}_c \neq \mathbf{0}$)	102
4.4.4	Inclusions perméables - avec capillarité ($\mathbf{k}^i \neq \mathbf{0}, \mathbf{p}_c \neq \mathbf{0}$)	105
4.5	Validation des modèles et discussion	108
4.6	Mise à l'échelle de la perméabilité relative	112
4.6.1	Méthodologie	112
4.6.1.1	Méthode de l'écoulement monophasique (SPA)	112
4.6.1.2	Méthode basée sur la simulation de l'écoulement diphasique (NURP)	114
4.6.2	Application aux différents cas d'inclusions	115
4.6.2.1	Inclusions imperméables	115
4.6.2.2	Inclusions semi-perméables	118
4.7	Conclusion	120
4.8	Appendice - Flux gravitaire effectif d'un milieu 1D avec variation de perméabilité, cas sans capillarité	121
	Bibliographie	123
5	Simulation numérique de l'injection de CO₂ dans des milieux 3D	125
5.1	Introduction	126
5.2	Présentation du code DuMu ^x	127
5.2.1	Présentation générale	127
5.2.2	Schéma de discrétisation spatiale	127
5.2.3	Schéma de discrétisation temporelle	128
5.2.4	Modèles disponibles pour la simulation de la migration de CO ₂	128
5.2.4.1	Classification des modèles	128
5.2.4.2	Formulation des modèles	130
5.2.5	Parallélisation	131

5.3	Mesure des performances du code DuMu ^x	132
5.3.1	Présentation du problème	133
5.3.2	Récapitulatif des simulations	134
5.3.3	Résultats numériques	134
5.3.3.1	L'effet du schéma numérique	134
5.3.3.2	L'effet du maillage	136
5.3.4	Discussion	138
5.4	Injection de CO ₂ dans un réservoir hétérogène tridimensionnel	139
5.4.1	Milieux périodiques	139
5.4.1.1	Présentation du cas test	139
5.4.1.2	Résultats numériques	140
5.4.2	Milieux fluviaux	140
5.4.2.1	Présentation du cas test	140
5.4.2.2	Résultats numériques	142
5.4.3	Réservoir SPE10	142
5.4.3.1	Présentation du cas test	142
5.4.3.2	Résultats numériques	143
5.5	Conclusion et perspectives	145
5.6	Appendice - Panorama des codes utilisés pour la séquestration géologique de CO ₂	146
5.7	Appendice - Variation du nombre d'itérations pour le cas Implicite - ALU-Grid - 2p	147
	Bibliographie	148
6	Conclusion générale et perspectives	151
6.1	Bilan de la thèse	152
6.2	Perspectives	154
	Bibliographie	155
	Appendices	157
A	Modèle mis à l'échelle, cas de l'injection dominante sans capillarité	161
A.1	Modèle analytique	162
A.2	Validation du modèle	167
A.2.1	Présentation du cas test	167
A.2.2	Calcul des paramètres effectifs	167
A.2.3	Résultat des simulations : Solution du problème macroscopique	169
A.2.4	Résultat des simulations : Dispersion longitudinale	170
A.3	Conclusion	172
B	Régime de gravité dominante, sans capillarité - Analyse perturbative	173
B.1	Introduction	174
B.2	Modèle analytique	174
B.3	Validation du modèle mis à l'échelle	180
B.3.1	Présentation du cas test	180
B.3.2	Flux gravitaire effectif	180
B.3.3	Solution du problème macroscopique	182

B.3.3.1	Résultat des simulations	182
B.3.3.2	Validation du modèle mis à l'échelle	185
B.4	Conclusion	185
	Bibliographie	187

Chapitre 1

Introduction

Le commencement est la moitié de tout.

Pythagore

Sommaire

1.1 Séquestration géologique du CO ₂	2
1.2 Principe du stockage	4
1.3 Objectif de la thèse	4
1.4 Plan du manuscrit	6
Bibliographie	9

1.1 Séquestration géologique du CO₂

De nos jours, il existe un consensus au sein de la communauté scientifique et de la population sur le fait que le climat de la planète est en train de changer et que ce changement est attribué, en grande partie, à l'activité des êtres humains (GIE, 2013; IPCC, 2007). L'utilisation des carburants d'origine fossile (charbon, pétrole ou gaz), l'élevage, l'utilisation de produits chimiques et la déforestation sont en effet à l'origine des émissions de gaz à effet de serre (GES), gaz reconnus comme la cause principale du réchauffement climatique de la planète.

Le dioxyde de carbone (CO₂) provenant essentiellement de l'utilisation des combustibles fossiles (pétrole, gaz, charbon . . .) représente plus de 60% de l'émission totale anthropique des GESs (GIE, 2007). Le contrôle des émissions de CO₂ devient donc une nécessité pour éviter les effets néfastes du changement climatique. Pour cela, le captage et stockage géologique du CO₂ (CSC) se présente comme l'une des mesures prometteuses à moyen et long terme pour réduire l'émission mondiale de CO₂. Le rapport publié en 2005 par le Groupement d'experts Intergouvernemental sur l'Evolution du Climat (GIEC) (GIE, 2005) prédit une réduction significative des émissions globales annuelles sur la période 2005-2095 en appliquant les mesures d'atténuation tel que le captage et stockage du CO₂ émis par le secteur industriel. Cette solution permettrait de réduire d'un tiers environ l'émission annuelle de CO₂.

On distingue trois grands types de formations géologiques considérées comme des réservoirs potentiels de stockage à long terme du CO₂ : les aquifères salins profonds, les gisements de pétrole et de gaz naturels déplétés et les veines de charbon profondes inexploitées. D'autres possibilités de stockage sont également envisagées telles que le stockage entre des strates de schistes ou dans certaines formations basaltiques. Parmi tous les types de réservoirs envisageables, les aquifères salins (couches de roches poreuses et perméables saturées en eau salée impropre à la consommation) offrent les capacités de stockage les plus importantes (environ de 10 000 milliards de tonnes de CO₂, chiffre estimé par le GIEC). Quelques projets de CSC dans les aquifères salins sont présentés dans le tableau 1.1.

Bien que le premier projet commercial d'injection de CO₂ et de H₂S dans un aquifère salin ait été réalisé dans le bassin d'Alberta au Canada au début des années 90 (Bachu et Gunter, 2004), le projet de Sleipner, situé dans le secteur norvégien de la mer du Nord, est reconnu comme l'opération commerciale pionnière dans le domaine du captage et stockage du CO₂. L'injection de CO₂ dans l'aquifère salin d'Utsira du champ de Sleipner Vest est menée depuis 1996. A ce jour, environ 15 millions tonnes de CO₂ ont déjà été stockées et plus de 2 millions tonnes de gaz supplémentaires seront injectées d'ici 2020.

L'aquifère d'Utsira, comme la plupart des aquifères géologiques, montre une architecture complexe de déposition, qui consiste en des blocs sableux hautement poreux (35% - 40%) et fortement perméables (Zweigel *et al.*, 2004), séparés par des couches fines de marnes imperméables (Figure 1.1). Grâce à de nombreuses données géologiques et géophysiques acquises sur le site, Sleipner est devenu le site de référence pour étudier et comprendre le comportement hydrodynamique du mélange CO₂ - saumure dans une formation géologique (Audigane *et al.*, 2007; Bickle *et al.*, 2007; Hayek *et al.*, 2009; Singh *et al.*, 2010).

Tableau 1.1 – Projets de CSC dans les aquifères salins (Michael *et al.*, 2010)

Projet	Location	Echelle	Début d'Inj.	Fin d'Inj.	Vitesse d'Inj. (t/jour)	Quantité prévue (kt)
Frio	Texas, USA	Pilote	2004	2006	250	1,6
Nagaoka	Japon	Pilote	2003	2005	40	10
Ketzin	Ketzin, Allemagne	Pilote	2008	2010	86	60
Alberta Bassin Acide-gaz	Alberta B.C., Canada	Commercial	1990		5-190	
Snohvit	Mer de Barents, Norvège	Commercial	2008		2 000	23 000
Sleipner	Mer du Nord, Norvège	Commercial	1996		2 700	20 000
In Salah	Krechba Algérie	Commercial	2004		3 500	17 000
Gorgon	Ile de Barrow, WA Australie	Commercial	2016		12 300	129 000
MGSC Decatur	Decatur, IL, Etats-Unis	Démonstration	2010	2012	1 000	1000
MRCSP Michigan Basin	Gaylord, MI, Etats-Unis	Pilote	2008	2009	300-600	600
SECARB Mississippi	Escatawpa, MS, Etats-Unis	Pilote	2008	2008	160	2,75
SECARB Early	Cranfield, MS, Etats-Unis	Démonstration	2009	2010	2 700	1 500

Les études sur Sleipner portent sur le développement conjoint de modèles mathématiques et de simulateurs numériques. Ceux-ci jouent un rôle très important pour : (i) l'évaluation de la faisabilité du stockage de CO₂ dans des formations souterraines ; (ii) l'analyse des essais in-situ ; et enfin (iii) la sélection de nouveaux sites de séquestration.

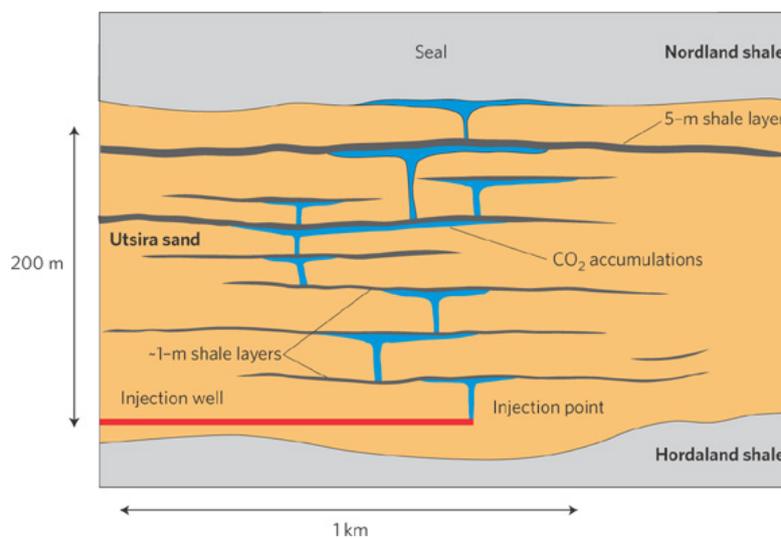


Figure 1.1 – Illustration schématique de l'injection de CO₂ sur le site de séquestration de Sleipner. Pendant le trajet de sa montée gravitaire, le CO₂ est piégé en dessous des strates peu perméables avant d'arriver à la roche de couverture Nordland. Noter l'exagération verticale (Bickle *et al.*, 2007).

1.2 Principe du stockage

Le CO₂ est injecté sous pression à un niveau suffisamment profond, environ 0,8 km de profondeur, afin qu'il passe de l'état gazeux à l'état supercritique (pression supérieure à 74 bars et température supérieure à 31°C). Le CO₂ supercritique possède des propriétés très particulières (Chadwick *et al.*, 2008) : une grande diffusivité, de l'ordre de celle des gaz, et une densité élevée qui le dote d'une capacité de stockage importante.

Après injection de CO₂, différents phénomènes physiques et chimiques se produisent et entraînent quatre mécanismes de piégeage (Bachu *et al.*, 2007; Johnson *et al.*, 2004) :

- **Accumulation sous la roche couverture ou stratification sous les strates peu perméables (piégeage structural ou stratigraphique)** : Comme le CO₂ supercritique est plus léger que la saumure environnante, il migre vers le haut sous l'effet de gravité. Le CO₂ s'accumule et se stratifie sous les strates imperméables qu'il rencontre sur le trajet de sa montée gravitaire.

- **Immobilisation dans les pores (piégeage résiduel)** : Dès que l'injection s'arrête, l'imbibition se produit au niveau de la queue du panache de CO₂ : la saumure tend à revenir dans les pores contenant du CO₂ et à remplacer partiellement ce dernier. Une portion du CO₂ est laissée sous forme de gouttelettes déconnectées ou résiduelles, et donc immobilisées dans les pores. Ce processus est appelé piégeage résiduel.

- **Dissolution (piégeage par solubilité)** : Une partie du CO₂ injecté se dissout dans la saumure du réservoir. L'eau salée contenant le CO₂ est plus lourde que la saumure, et par conséquent migre vers le bas du réservoir, ce qui diminue le risque de fuite du CO₂ à travers la roche de couverture.

- **Minéralisation (piégeage minéral)** : La dissolution du CO₂ dans la saumure va créer de l'acide carbonique, qui peut réagir avec les minéraux de la roche d'accueil. Ce processus, qui dépend des caractéristiques chimiques de la roche et de l'eau dans le réservoir, peut être rapide ou très lent. Dans tous les cas, il lie efficacement le CO₂ à la roche.

Les deux premiers mécanismes de piégeage sont communément appelés *piégeages hydrodynamiques*, tandis que les deux derniers sont considérés comme des *piégeages géochimiques*.

1.3 Objectif de la thèse

Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons particulièrement au piégeage structural/stratigraphique, qui est le mécanisme de piégeage dominant pendant la phase d'injection et au début de la période de stockage. Nous négligeons tous les phénomènes chimiques ainsi que l'immobilisation résiduelle du CO₂ dans les pores. À l'échelle de temps considérée, la majeure partie du CO₂ reste dans l'état supercritique. Par conséquent, pour étudier la stratification du CO₂ sous les strates imperméables, un modèle

d'écoulement diphasique incompressible et immiscible est tout à fait approprié.

Au cours de ces dernières années, plusieurs travaux de recherche ont été menés pour étudier par simulation numérique l'écoulement multiphasique dans les milieux poreux en général, et la migration du CO₂ dans les réservoirs géologiques en particulier (Oldenburg *et al.*, 2001; Pruess et Garcia, 2002; Pruess *et al.*, 2004; Flemisch *et al.*, 2011; Lie *et al.*, 2012). Cependant, intégrer toutes les données géologiques d'un réservoir dans des simulations pose des problèmes en termes de temps de calcul et de taille de mémoire. Par conséquent, il est souhaitable de disposer de modèles globaux ou effectifs permettant de simuler l'écoulement dans des milieux homogènes équivalents et qui sont capables de tenir compte de l'influence de la variabilité de faciès à micro-échelle sur le comportement des fluides à macro-échelle. La technique utilisée pour le transfert des informations à partir des échelles inférieures vers l'échelle du réservoir est nommée "méthode de mise à l'échelle" (upscaling, en anglais).

Afin d'étudier analytiquement l'effet de l'hétérogénéité sur la migration du CO₂, les modèles géologiques conceptuels, soit périodiques, soit aléatoires, sont utilisés très fréquemment. Une approche efficace pour traiter le problème de l'écoulement dans les milieux aléatoires est l'approche stochastique. Cette technique est basée sur l'hypothèse de distribution aléatoire des hétérogénéités. Elle conduit à calculer des paramètres effectifs en prenant la moyenne stochastique des équations hydrodynamiques (Yeh *et al.*, 1985; Mantoglou et Gelhar, 1987; Desbarats, 1995; Chang *et al.*, 1995; Neuweiler *et al.*, 2003; Efendiev et Durlofsky, 2003). Néanmoins, cette méthode n'est valable que pour des milieux faiblement hétérogènes, i.e. les paramètres hétérogènes du milieu tels que la perméabilité, la porosité ... sont du même ordre de grandeur entre les couches.

Dans le cadre de cette thèse, nous considérons des milieux stratifiés avec des variations verticales significatives de perméabilité comme représenté schématiquement sur le site de séquestration de Sleipner. L'objectif principal est la mise à l'échelle, de l'échelle d'écoulement local à l'échelle du réservoir, d'un modèle d'écoulement diphasique *avec gravité et capillarité* au sein d'un milieu stratifié constitué d'un réseau périodique de barrières peu perméables horizontales, continues ou discontinues. Le cadre théorique est la méthode de développement asymptotique à double échelle pour les milieux périodiques (Sánchez-Palencia, 1980; Bensoussan *et al.*, 1978).

Notons que la prise en compte de la gravité introduit des difficultés mathématiques dans toutes les méthodes de mise à l'échelle car elle conduit à la ségrégation gravitaire des phases, ce qui change entièrement la physique (Yortsos, 1995). La migration immiscible par gravité du CO₂ dans les aquifères confinés homogènes et infinis est étudiée par de nombreux auteurs (Hesse *et al.*, 2007, 2008; MacMinn *et al.*, 2010) à l'aide de l'approche des courants de gravité (gravity current (GC) en anglais). Récemment, Golding *et al.* (2011) ont étendu cette approche pour considérer la migration du mélange diphasique autour d'une barrière horizontale imperméable d'une longueur finie, en prenant en compte la capillarité. Cependant, à ce jour, il y a très peu de travaux de recherche sur l'écoulement diphasique dans un milieu stratifié périodique. Ce sujet fait l'objet de ce travail de thèse.

1.4 Plan du manuscrit

Ce travail de thèse s'articule essentiellement autour de la construction de modèles analytiques de mise à l'échelle, accompagnée par des simulations numériques de l'écoulement diphasique. Les modèles homogénéisés présentés dans ce manuscrit sont développés pour différents types de milieux stratifiés périodiques à l'aide de la théorie d'homogénéisation et de l'approche GC. Nous commençons par des milieux parfaitement stratifiés dont les strates sont continues et de longueurs infinies. Notre étude est ensuite étendue au cas de l'écoulement dans un milieu bi-dimensionnel constitué de strates discontinues. Finalement, nous considérons différents types de milieux hétérogènes tridimensionnels.

La validation numérique de ces modèles exige un code numérique efficace dans la simulation des écoulements multiphasiques en milieux hétérogènes. Par efficace nous signifions suffisamment précis en termes de schéma numérique, des temps de calcul raisonnables pour des maillages de quelques centaines de milliers d'éléments et enfin suffisamment ergonomique pour pouvoir étudier n'importe quelle géométrie. Ce souci d'efficacité nous a conduit à tester plusieurs codes/outils, tels que MRST (Sintef, www.sintef.no/projectweb/mrst/), TOUGH2 (LBNL, <http://esd1.lbl.gov/research/projects/tough/>) et DuMu^x (Flemisch *et al.* (2011), <http://www.dumux.org/>). Finalement nous avons convergé vers DuMu^x, code développé par l'Université de Stuttgart. Dans ce qui suit, toutes les simulations des écoulements dans les milieux 2D et 3D sont réalisées à l'aide de ce code.

La suite de ce manuscrit est organisée selon les chapitres suivants :

Chapitre 2 : Mise à l'échelle de la migration du CO₂ à travers un milieu périodique parfaitement stratifié

Nous considérons dans ce chapitre la migration du mélange diphasique CO₂-saumure dans un milieu périodique parfaitement stratifié constitué de couches homogènes continues perpendiculaires à la direction d'écoulement. Cette configuration conduit à un modèle unidimensionnel. Lorsque les forces de gravité et de capillarité sont présentes, l'hydrodynamique du mélange diphasique à l'interface entre les couches est gouvernée par la continuité du flux total et de la pression capillaire. Ces deux conditions de continuité servent à la construction des modèles de mise à l'échelle pour différents régimes d'écoulement qui sont caractérisés par l'importance relative entre les forces de gravité et de capillarité. Le flux gravitaire mis à l'échelle est ensuite déterminé pour chacun des cas à partir de la résolution d'un problème à l'échelle de la cellule. Dans le cas où l'effet de gravité est dominant à l'échelle macroscopique, la présence de ségrégation gravitaire rend le problème local non standard ; une résolution numérique est alors nécessaire. Les modèles homogénéisés sont ensuite validés par simulation numérique pour le cas capillarité dominante et et le cas où la gravité et la capillarité sont du même ordre de grandeur. Toutes les simulations sont réalisées avec un code "fait maison" basé sur l'algorithme de C. Cancès (Cances, 2008) et utilisant le schéma de discrétisation de Godunov (Godunov, 1959).

Cette partie sera soumise sous forme d'article au journal *Advances in Water Resources*.

Chapitre 3 : Migration par gravité du CO₂ autour de et à travers une strate semi-perméable isolée

Avant d'étudier l'écoulement du CO₂ au sein d'un milieu multistrate périodique bidimensionnel, il faut tout d'abord considérer la migration du mélange diphasique autour et à travers une strate isolée. Notons que le cas où la strate est imperméable a été étudié par Golding *et al.* (2011). Le traitement des strates semi-perméables et en prenant en compte à la fois la gravité et la capillarité nous conduit à considérer le comportement hydrodynamique des fluides à l'interface entre la matrice et la strate. Pour cette étude, nous considérons, dans un premier temps, l'écoulement du CO₂ dans un milieu bi-couche dont la perméabilité de chaque couche est différente. Le passage de CO₂ à travers l'interface est discuté pour chaque combinaison de perméabilités du milieu.

Nous étudions ensuite la migration du CO₂ dans un réservoir constitué d'une seule strate isolée. Comme la barrière est semi-perméable, le CO₂ peut soit passer à travers la strate, soit s'accumuler et s'étaler sous l'interface matrice-strate et remonter vers l'extrémité des strates. Nous avons proposé un nouveau modèle de courant de gravité prenant en compte le terme de fuite à travers la barrière dans deux cas, sans et avec capillarité. Pour clore ce chapitre, des cas tests numériques sont effectués afin de valider le modèle proposé.

Cette partie constitue un article à soumettre à Journal of Fluid Mechanics, dont la mise en page a été adaptée au format du manuscrit.

Chapitre 4 : Mise à l'échelle de la migration de CO₂ dans un système périodique de strates

Ce chapitre décrit la mise à l'échelle de l'écoulement d'un panache de CO₂ dans un système stratifié périodique bi-dimensionnel. L'objectif est de déterminer les lois et paramètres mis à l'échelle du milieu homogène équivalent, tels que le flux effectif et les perméabilités absolue et relative. En supposant que la condition initiale et les conditions aux limites du milieu sont symétriques, le problème se simplifie donc en la migration du CO₂ dans une colonne verticale constituée de strates discontinues décalées.

Dans un premier temps, nous démontrons, par modélisation analytique et simulation numérique, que le flux gravitaire entrant dans la colonne ne peut pas dépasser une valeur maximale. Ensuite, nous effectuons un développement asymptotique à double échelle, qui montre que quand la gravité est dominante, le flux mis à l'échelle ne peut être déterminé qu'à partir de la résolution d'un problème local non standard. La particularité de ce problème est notamment liée à la stratification du CO₂ sous l'effet de gravité dans la cellule, qui ne peut pas être décrite par la méthode d'homogénéisation classique. Le problème local est donc résolu à l'aide de l'approche GC. Différents cas sont étudiés : nous considérons tout d'abord un cas simplifié, inclusion imperméable et sans capillarité, que nous étendons progressivement en étudiant les inclusions perméables et en prenant compte la capillarité.

Le flux mis à l'échelle est déterminé et ensuite comparé à celui obtenu à partir des simulations numériques pour chacun des cas. Pour finir, les courbes de perméabilité

relative mises à l'échelle sont déterminées à l'aide de deux approches : une approche semi-analytique SPA (Single-Phase Averaging) et une autre approche *a posteriori* NURP (Numerical Upscaled Relative Permeability). L'approche SPA suppose une ségrégation complète des deux phases. Elle est basée sur l'approximation qui considère l'écoulement diphasique comme la somme de deux écoulements indépendants : un écoulement monophasique de type Darcy d'une phase et un écoulement dans des courants de gravité de l'autre phase. Ces écoulements ont lieu dans un espace restreint par les strates et l'écoulement de l'autre phase. Les perméabilités relatives obtenues à l'aide de l'approche NURP sont calculées directement à partir des résultats des simulations numériques effectuées avec le code DuMu^x. Le domaine de validité de chaque méthode est ensuite discuté.

Chapitre 5 : Simulation numérique de l'injection de CO₂ dans des milieux 3D

Au vu de la complexité des problèmes physiques soulevés dans les milieux 2D, nous considérons le problème de l'écoulement tri-dimensionnel de façon prospective. Concrètement, nous avons effectué une étude numérique de l'injection et de la migration du CO₂ dans un réservoir tridimensionnel. Dans un premier temps, nous avons étudié la performance du code DuMu^x à simuler par parallélisation un écoulement diphasique incompressible et immiscible dans un réservoir homogène tridimensionnel. Dans un second temps, nous montrons quelques résultats des simulations numériques de l'injection et de la migration du CO₂ dans différents types de milieux hétérogènes tridimensionnels : milieux périodiques, milieux fluviaux et milieu réservoir SPE 10.

Les résultats présentés dans ce chapitre font l'objet d'un article en cours de rédaction.

Bibliographie

- (2005). Rapport spécial du GIEC - piégeage et stockage du dioxyde de carbone.
- (2007). 4^{ème} rapport du GIEC sur les changements climatiques et leurs évolutions futures. <http://leclimatchange.fr/>.
- (2013). 5^{ème} rapport du GIEC sur les changements climatiques et leurs évolutions futures. <http://leclimatchange.fr/>.
- AUDIGANE, P., GAUS, I., CZERNICHOWSKI-LAURIOL, I., PRUESS, K. et XU, T. (2007). Two-dimensional reactive transport modeling of CO₂ injection in a saline aquifer at the sleipner site, north sea. *American Journal of Science*, 307(7):974–1008.
- BACHU, S., BONIJOLY, D., BRADSHAW, J., BURRUSS, R., HOLLOWAY, S., CHRISTENSEN, N. P. et MATHIASSEN, O. M. (2007). CO₂ storage capacity estimation : methodology and gaps. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1(4):430–443.
- BACHU, S. et GUNTER, W. D. (2004). Acid-gas injection in the alberta basin, canada : a CO₂ storage experience. *Geological Society London Special Publications*, 233(1):225–234.
- BENSOUSSAN, A., LIONS, J.-L. et PAPANICOLAOU, G. (1978). *Asymptotic analysis for periodic structures. Studies in mathematics and its applications.*, volume 374. Elsevier Science Ltd.
- BICKLE, M., CHADWICK, A., HUPPERT, H. E., HALLWORTH, M. et LYLE, S. (2007). Modelling carbon dioxide accumulation at sleipner : Implications for underground carbon storage. *Earth and Planetary Science Letters*, 255(1):164–176.
- CANCES, C. (2008). *Two-phase flows in heterogeneous porous media : modeling and analysis of the flows of the effects involved by the discontinuities of the capillary pressure.* Thèse de doctorat, Université de Provence - Aix - Marseille I.
- CHADWICK, A., ARTS, R., BERNSTONE, C., MAY, F., THIBEAU, S. et ZWEIGEL, P. (2008). Best practice for the storage of CO₂ in saline aquifers. *British Geological Survey Occasional Publication*, 14:267.
- CHANG, C.-M., KEMBLOWSKI, M. W., KALUARACHCHI, J. J. et ABDIN, A. (1995). Stochastic analysis of two-phase flow in porous media : I. spectral/perturbation approach. *Transport in Porous Media*, 19(3):233–259.
- DESBARATS, A. (1995). Upscaling capillary pressure-saturation curves in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 31(2):281–288.
- EFENDIEV, Y. et DURLOFSKY, L. (2003). A generalized convection-diffusion model for subgrid transport in porous media. *Multiscale Modeling & Simulation*, 1(3):504–526.
- FLEMISCH, B., DARCIS, M., ERBERTSEDER, K., FAIGLE, B., LAUSER, A., MOSTHAF, K., MÜTHING, S., NUSKE, P., TATOMIR, A., WOLFF, M. et al. (2011). DuMux : DUNE for multi-{phase, component, scale, physics,...} flow and transport in porous media. *Advances in Water Resources*, 34(9):1102–1112.

- GODUNOV, S. K. (1959). A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 89(3):271–306.
- GOLDING, M. J., NEUFELD, J. A., HESSE, M. A. et HUPPERT, H. E. (2011). Two-phase gravity currents in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 678:248–270.
- HAYEK, M., MOUCHE, E. et MÜGLER, C. (2009). Modeling vertical stratification of CO₂ injected into a deep layered aquifer. *Advances in Water Resources*, 32(3):450 – 462.
- HESSE, M., ORR, F. et TCHELEPI, H. (2008). Gravity currents with residual trapping. *Journal of Fluid Mechanics*, 611:35–60.
- HESSE, M., TCHELEPI, H., CANTWEL, B. et ORR, F. (2007). Gravity currents in horizontal porous layers : transition from early to late self-similarity. *Journal of Fluid Mechanics*, 577:363–383.
- IPCC (2007). Climate change : Synthesis report. contribution of working groups i, ii and iii to the fourth assessment report of the intergovernmental panel on climate change.
- JOHNSON, J. W., NITAO, J. J. et KNAUSS, K. G. (2004). Reactive transport modeling of CO₂ storage in saline aquifers to elucidate fundamental processes, trapping mechanisms and sequestration partitioning. *Geological storage of carbon dioxide*, 233:107–128.
- LIE, K.-A., KROGSTAD, S., LIGAARDEN, I. S., NATVIG, J. R., NILSEN, H. M. et SKAFLESTAD, B. (2012). Open-source matlab implementation of consistent discretisations on complex grids. *Computational Geosciences*, 16(2):297–322.
- MACMINN, C. W., SZULCZEWSKI, M. L. et JUANES, R. (2010). CO₂ migration in saline aquifers. Part 1. Capillary trapping under slope and groundwater flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 662:329–351.
- MANTOGLOU, A. et GELHAR, L. W. (1987). Stochastic modeling of large-scale transient unsaturated flow systems. *Water Resources Research*, 23(1):37–46.
- MICHAEL, K., GOLAB, A., SHULAKOVA, V., ENNIS-KING, J., ALLINSON, G., SHARMA, S. et AIKEN, T. (2010). Geological storage of CO₂ in saline aquifers—a review of the experience from existing storage operations. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 4(4):659–667.
- NEUWEILER, I., ATTINGER, S., KINZELBACH, W. et KING, P. (2003). Large scale mixing for immiscible displacement in heterogeneous porous media. *Transport in Porous Media*, 51(3):287–314.
- OLDENBURG, C., PRUESS, K. et BENSON, S. M. (2001). Process modeling of CO₂ injection into natural gas reservoirs for carbon sequestration and enhanced gas recovery. *Energy & Fuels*, 15(2):293–298.
- PRUESS, K. et GARCIA, J. (2002). Multiphase flow dynamics during CO₂ disposal into saline aquifers. *Environmental Geology*, 42(2-3):282–295.

- PRUESS, K., GARCÍA, J., KOVSCEK, T., OLDENBURG, C., RUTQVIST, J., STEEFEL, C. et XU, T. (2004). Code intercomparison builds confidence in numerical simulation models for geologic disposal of CO₂. *Energy*, 29(9):1431–1444.
- SÁNCHEZ-PALENCIA, E. (1980). *Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127. Springer-Verlag Berlin.
- SINGH, V. P., CAVANAGH, A., HANSEN, H., NAZARIAN, B., IDING, M. et RINGROSE, P. S. (2010). Reservoir modeling of CO₂ plume behavior calibrated against monitoring data from Sleipner, Norway. *Society of Petroleum Engineers*.
- YEH, T.-C. J., GELHAR, L. W. et GUTJAHN, A. L. (1985). Stochastic analysis of unsaturated flow in heterogeneous soils : 1. statistically isotropic media. *Water Resources Research*, 21(4):447–456.
- YORTSOS, Y. (1995). A theoretical analysis of vertical flow equilibrium. *Transport in Porous Media*, 18(2):107–129.
- ZWEIGEL, P., ARTS, R., LOTHE, A. E. et LINDEBERG, E. B. (2004). Reservoir geology of the utsira formation at the first industrial-scale underground CO₂ storage site (sleipner area, north sea). *Geological Society, London, Special Publications*, 233(1):165–180.

Chapitre 2

Upscaling of CO₂ vertical migration through a periodically layered media

Bad times have a scientific value. These are occasions a good learner would not miss.

Ralph Waldo Emerson

Sommaire

2.1	Introduction	14
2.2	Two-phase incompressible, immiscible flow model	16
2.3	Upscaled model	19
2.4	Validation of upscaled models	27
2.5	Summary and conclusions	34
	Bibliographie	36

2.1 Introduction

Nowadays, it is widely recognized that anthropogenic activities, particularly the burning of fossil fuels, is the main reason of the increasing of carbon dioxide (CO₂) accumulation in the atmosphere. This trend, with a constant acceleration, contributes largely to global warming. It expressed urgency to find short-term and medium-term solutions that allow a cleaner employment of fossil fuels, while giving us time to develop the technology and infrastructure required by renewable energy utilization.

Among the various techniques to reduce greenhouse gas emissions, the geological storage of CO₂ in supercritical form in gas or oil depleted reservoirs or deep saline aquifers have emerged as one of potential solutions due to their immediate reduction of emissions, the large volumes available, and the wide geographic distribution of these formations (Philippe and René, 2003). Of all the possible CO₂ storage options, geosequestration in saline aquifers is generally considered as having the greatest CO₂ storage potential (Mouche et al., 2010; Michael et al., 2010). It should be noticed that the Sleipner project which started in 1996 is the world's first demonstration of carbon dioxide capture and underground storage. The CO₂ is injected at a level deep enough to achieve the supercritical state promoting the injectivity and the effective storage capacity. After injection, the CO₂ which is lighter than surrounding brine rise upward to the top of the reservoir due to the buoyancy effect and stratifies under low-permeability layers. At Sleipner, the sub-surface CO₂ plume has been monitored from the surface by time-lapse seismic surveys. The seismic data obtained in 2002 showed the CO₂ accumulation under the mudstone layers (Figures 2.1).

Geological reservoirs are in general heterogeneous. Geological heterogeneity which includes variations in porosity, lithology, mechanical properties, structure... has significant effect on the transport in the porous media. Furthermore, the multiphase flow model amplifies the impact of small-scale structures and heterogeneity on macro-scale behavior. Simulating multiphase flow in complex but realistic medium requires a very high numerical resolution that leads to a colossal CPU times as well as poses challenges for the convergence of mathematical schemes. Therefore, it is desirable to derive global or effective models of equivalent homogeneous reservoirs which take into account the influence of micro-structure on the macro-scale behavior. The technique used for transforming information from the process scale to the simulation scale is named upscaling. Different categories of the such technique are outlined by Eichel et al. (2005). Among them, the homogenization method using asymptotic expansion draws our attention because this approach is suitable to the modeling of multiphase flow in stratified media, which is the case of some sequestration sites, e.g. Utsira formation at the Sleipner field.

Although gravity effect on migration of fluids was investigated in the past using both analytical (Shvidler and Levi, 1970; Siddiqui and Lake, 1997; Silin et al., 2009; Nordbotten et al., 2005) and numerical approaches by a number of researchers (Doughty, 2007; Riaz et al., 2008), the upscaling of such a problem is less studied than the capillary-driven and viscous-driven flow problems. Szymkiewicz et al. (2011) studied the upscaling of incompressible or slightly compressible two phase flow in 2D porous media in the capillary dominant case using homogenization method. In this work, the effective parameters and the upscaled constitutive relationship are numerically derived by using the capillary

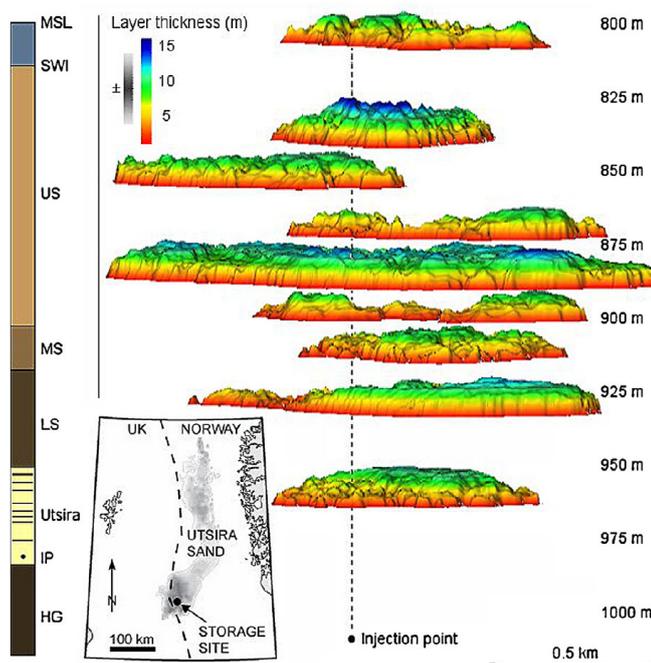


Figure 2.1 – The Sleipner plume profile, viewed from the southeast, circa July 2002. The Figure shows the distribution of injected CO_2 after 5 Mt of injected CO_2 (Bickle et al., 2007). The nine plume layers are well defined aerially, having ponded beneath intra-formational shales within the Utsira Sand. (after Cavanagh and Haszeldine (2014))

equilibrium assumption.

Panfilov and Floriat (2004) proposed an upscaled model which seems to be applicable only to the viscous-driven case. Bolster et al. (2011) investigated the impact of buoyancy on front spreading in low heterogeneous porous media in two-phase immiscible flow using stochastic method.

Mouche et al. (2010) proposed an homogenized model for the migration of CO_2 plume under buoyancy effect in a vertical column consisting of a perfectly periodic layered porous medium. Moreover, although this model works well for capillary-free flow, it cannot be applied to the case where the capillarity and gravity force are in the same order of magnitude. This paper addresses this case and complements the work of Mouche et al. (2010).

In the present work, one of the main cases of interest is the countercurrent flow, $\mathbf{q}_t = 0$, which means that there is no phase injection into the column. We consider vertical rise towards the top of reservoir due to gravity effect in a 1D vertical column with periodic variation of permeability (Figure 2.2). The dynamics of the two phase flow CO_2 -brine depends strongly on the scaling of the relative ratio between gravity and capillarity forces, characterized by the *capillary number* N_c which will be defined in Section 2.2.2. According to the value of N_c at microscale, we classify the problem into four different

regimes of CO₂ migration : capillarity-dominant flow ($N_c \gg 1$), balance case ($N_c \approx 1$), gravity-dominant flow ($N_c \ll 1$) and capillary-free flow ($N_c = 0$). For each case, a theoretical result is developed and compared to numerical simulation results.

To complete this research, we address the case where all processes are present : capillarity, gravity and viscosity. We propose and validate a model of CO₂ migration with a low injection rate at the inlet of a periodically stratified media. The matching between analytical and numerical results proves the accuracy of the homogenization method.

2.2 Two-phase incompressible, immiscible flow model

2.2.1 Mathematical formulation

We consider a vertical column filled with a periodic layered porous medium made up of low and high permeability layers (Figure 2.2). Without any loss of generality we assume that the layers have the same thickness equal to δ_c . The column height is H and supposed to be much greater than δ_c . Consequently, the small parameter $\varepsilon = \delta_c/H$ is much smaller than one, $\varepsilon \ll 1$. Only the intrinsic permeability is supposed to be heterogeneous and the other material parameters (*e.g.* porosity) remain constant over the medium. The absolute permeabilities of the low and high permeability layers are k^- and k^+ respectively.

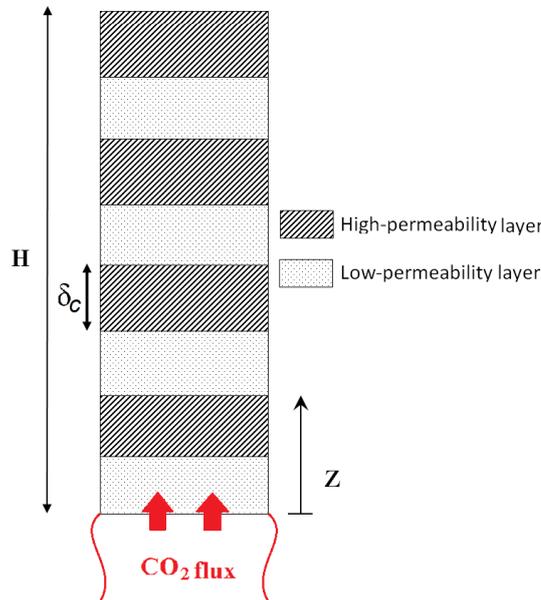


Figure 2.2 – Vertical periodic stratified porous medium.

Let us consider two-phase flow and assume that the fluids are incompressible, immiscible and there is no mass transfer between phases. Such a problem can be described by mass conservation equations and modified Darcy's law for the two phases. The mass balance of phase α is expressed as :

$$\phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial q_\alpha}{\partial z} = \mathcal{S}_\alpha, \quad \alpha = nw, w, \quad (2.1)$$

where ϕ [-] is the porosity of the medium, the subscripts w and nw denote the wetting (brine) and non-wetting (CO₂) phase. S_α [-], q_α [L/T] and \mathcal{S}_α [L/T] are respectively the saturation, darcian velocity and sink/source terms of the phase α , z is the spatial direction oriented positively upwards. The velocity q_α is given by the modified Darcy's law :

$$q_\alpha = -\frac{k k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} \left(\frac{\partial p_\alpha}{\partial z} - \rho_\alpha g \right), \quad \alpha = nw, w, \quad (2.2)$$

where g [L/T^2] is the gravity acceleration ; k [L^2] is the absolute permeability of medium in single phase flow which varies spatially within heterogeneous media $k = k(z)$; p_α [M/(LT²)], ρ_α [M/L³], μ_α [M/(LT)] and k_{r_α} [-] denote, respectively, the pressure, the density, the viscosity and the relative permeability of phase α . The relative permeabilities are assumed to be functions of the phase saturations only. They can be given by either a Van Genuchten (Van Genuchten, 1980) or a Brooks and Corey's (Brooks and Corey, 1964) model. In this paper, only Brooks-Corey is considered :

$$k_{r_w} = S_{w_e}^2, \quad (2.3)$$

$$k_{r_{nw}} = (1 - S_{w_e})^2, \quad (2.4)$$

where S_{w_e} denotes the normalized wetting saturation, defined by :

$$S_{w_e} = \frac{S_w - S_{w_r}}{1 - S_{w_r} - S_{nw_r}}. \quad (2.5)$$

In Eq. (2.5), S_{α_r} denotes the residual saturation (or irreversible saturation) of phase α . For simplicity, in this paper we neglect all residual saturations. The saturations of wetting and non-wetting phase sum up to 1 : $S_w + S_{nw} = 1$. In what follows, the saturation of non-wetting phase S_{nw} is written for convenience as S . Therefore, Eqs. (2.3) and (2.4) can be rewritten as :

$$k_{r_w}(S) = (1 - S)^2, \quad (2.6)$$

$$k_{r_{nw}}(S) = S^2. \quad (2.7)$$

The capillary pressure is defined as :

$$p_c(S, z) = p_{nw} - p_w. \quad (2.8)$$

and is given by the Leverett relationship

$$p_c = \sigma \sqrt{\frac{\phi}{k(z)}} J(S), \quad (2.9)$$

where $J(S) = (1 - S)^{-\frac{1}{2}}$ is the Leverett J -function depending on the saturation of non-wetting phase, σ [Pa] is the interfacial tension between phases. The entry pressure corresponds to the capillary pressure value when $S = 0$:

$$p_e(z) = p_c(0, z) = \sigma \sqrt{\frac{\phi}{k(z)}}. \quad (2.10)$$

Eqs. (2.2) and (2.8) allow to recast the non-wetting phase darcian velocity as following :

$$q_{nw} = q_t f(S) + \frac{k(z)}{\mu_w} \Lambda(S) \left(\Delta \rho g - \frac{\partial p_c}{\partial z} \right), \quad (2.11)$$

where q_t is the total velocity :

$$q_t = q_w + q_{nw}, \quad (2.12)$$

and

$$f(S) = \frac{k_{r_{nw}}(S)}{k_{r_{nw}}(S) + M k_{r_w}(S)}, \quad \Lambda(S) = \frac{k_{r_{nw}}(S) k_{r_w}(S)}{k_{r_{nw}}(S) + M k_{r_w}(S)}, \quad (2.13)$$

with $M = \mu_{nw}/\mu_w$, the viscosity ratio, and $\Delta \rho = \rho_w - \rho_{nw}$. As the system is unidimensionnal the total velocity is constant, equal to zero in the case of counterflow (no injection) or to the CO₂ injection rate at the bottom of the column if CO₂ is injected into the domain. In Eq. (2.13), $f(S)$ is the fractional flux, a monotonic increasing S-shaped function and $\Lambda(S)$ the buoyant flux function, a S-bell shaped function (Hayek et al., 2009; Mikelic et al., 2002; Van Duijn et al., 2007).

Since sink/source terms are absent and by substituting Eq. (2.11) into Eq. (2.1), we deduce :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ q_t f(S) + \frac{k(z)}{\mu_w} \Lambda(S) \left(\Delta \rho g - \frac{\partial p_c}{\partial z} \right) \right\} = 0. \quad (2.14)$$

2.2.2 Dimensionless equations

Let us define dimensionless variables by dividing each physical variables by its characteristic value. It should be noted that the dimensionless numbers for two-phase flow at the macro-scale can be different from one author to another. In order to consider large scale behavior of the fluids, the depth H of the medium is set as the characteristic length scale and the time T for CO₂ to migrate all along the column filled with the high permeability material only is set as the characteristic time of observation. The intrinsic permeability of this material k^+ is also chosen as the permeability scale of the medium. In the following equation, the characters with hat denotes the dimensionless variables :

$$\hat{z} = \frac{z}{H}, \quad \hat{k}(z) = \frac{k(z)}{k^+}, \quad \hat{t} = \frac{k^+ g (\rho_w - \rho_g)}{\phi H \mu_w} t. \quad (2.15)$$

These scalings allow to introduce our definitions of the capillary number N_c and viscous number N_q :

$$N_c = \frac{\sigma}{(\rho_w - \rho_{nw}) g H} \sqrt{\frac{\phi}{k^+}}, \quad N_q = \frac{q_t \mu_w}{(\rho_w - \rho_{nw}) g k^+}. \quad (2.16)$$

The capillary number and the viscous number measure at the column scale the relative importance of the capillary flux and the viscous flux respectively with respect to the gravity flux. Note that the capillary number depends on the dimension of the domain. Thus, it might be worth introducing the notion of capillary number at microscale. The capillary number at micro scale, denoted N_c^* , is scaled by the layer thickness δ_c instead of the column height H .

$$N_c^* = \frac{\sigma}{(\rho_w - \rho_{nw}) g \delta_c} \sqrt{\frac{\phi}{k^+}} = \frac{N_c}{\varepsilon}. \quad (2.17)$$

By using the dimensionless number in Eq. 2.16, the dimensionless non-wetting phase transport equation reads :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ N_q f(S) + k(z) \Lambda(S) \left(1 - \frac{N_c}{\sqrt{k(z)}} J'_s \frac{\partial S}{\partial z} \right) \right\} = 0. \quad (2.18)$$

where, to simplify notations, dimensionless variables are written without hats.

In the Eq. (2.18), the quantity inside the braces is the flux of the non-wetting phase Φ :

$$\Phi(S) = N_q f(S) + k(z) \Lambda(S) \left(1 - \frac{N_c}{\sqrt{k(z)}} J'_s \frac{\partial S}{\partial z} \right). \quad (2.19)$$

The two first terms in Eq. (2.19) represent the convective flux $\mathcal{C}(S) = F(S) + G(S) = N_q f(S) + k(z) \Lambda(S)$ and the last term the diffusive flux $\mathcal{D}(S)$.

2.3 Upscaled model

CO₂ migration in a porous medium with periodically varying permeability can be upscaled by adopting the homogenization procedure introduced by Bensoussan et al. (1978) and Sánchez-Palencia (1980). Following the work of Mouche et al. (2010), we introduce two spatial variables, the macroscale variable z and the microscale variable $\xi = z/\varepsilon$. The permeability is defined as :

$$k^\varepsilon(z) = k(z/\varepsilon) = k(\xi) = \begin{cases} k^- & \text{if } 2i - 1 \leq \xi \leq 2i, \\ k^+ & \text{if } 2i \leq \xi \leq 2i + 1, \end{cases} \quad (2.20)$$

where the interfaces between the layers are located at the points $\{\varepsilon i : i \in \mathcal{Z}\}$.

A characteristic cell Ω contains a low-permeability layer ($-1 < \xi < 0$) and a high-permeability layer ($0 < \xi < 1$). The saturation can be rewritten as power series of ε :

$$S(z, t) \equiv S(z, \xi, t) = S_0(z, \xi, t) + \varepsilon^1 S_1(z, \xi, t) + \varepsilon^2 S_2(z, \xi, t) + \dots$$

where the function $S_i(z, \xi, t)$ is periodic in ξ .

A macroscale model will be called of order n if it describes the behavior of the upscaled saturation $\bar{S}(z, t)$ up to the ε^n order (Panfilov and Floriat, 2004). We consider the zeroth-order upscaled model of the problem. The effective saturation is thus defined as the averaged value of $S_0(z, \xi, t)$ over the cell Ω :

$$\bar{S}(z, t) = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} S_0(z, \xi, t) d\Omega = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 S_0(z, \xi, t) d\xi. \quad (2.21)$$

The derivation operator with respect to z becomes :

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (2.22)$$

Substituting the saturation expansion Eq. (2.21) and the derivation Eq. (2.22) into Eq. (2.18), we obtain :

$$\frac{\partial(S_0 + \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 S_2 + \dots)}{\partial t} + \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \Phi(\xi, S) = 0 \quad (2.23)$$

The asymptotic form of flux term reads :

$$\begin{aligned} \Phi(S) \equiv \Phi(\xi, S) &= \gamma(\xi, S) + \alpha(\xi, S) - \left(\frac{\partial S}{\partial z} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial S}{\partial \xi} \right) \beta(\xi, S) \\ &= \varepsilon^{-1} \Phi_{-1}(\xi, S_0) + \varepsilon^0 \Phi_0(\xi, S_0, S_1) + \varepsilon^1 \Phi_1(\xi, S_0, S_1, S_2) + \dots \end{aligned} \quad (2.24)$$

with

$$\alpha(\xi, S) = k(\xi) \Lambda(S), \quad \beta(\xi, S) = N_c \sqrt{k(\xi) \Lambda(S)} \frac{dJ}{dS}, \quad \gamma(S) = N_q f(S). \quad (2.25)$$

Here and at the sequel, the first and second derivatives in S of function $\Psi(\xi, S)$ will be respectively denoted as $\Psi'(\xi, S)$ and $\Psi''(\xi, S)$. The function $\Phi(S)$, $\frac{dJ}{dS}$, $\alpha(\xi, S)$, $\beta(\xi, S)$ and $\gamma(S)$ must also be expanded as power series of ε :

$$\begin{aligned} \Lambda(S) &= \Lambda(S_0 + \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 S_2 + \dots) \\ &= \Lambda(S_0) + \varepsilon S_1 \Lambda'(S_0) + \varepsilon^2 \left(\frac{1}{2} (S_1)^2 \Lambda''(S_0) + S_2 \Lambda'(S_0) \right), \\ J'(S) &= J'(S_0) + \varepsilon S_1 J''(S_0) + \dots, \\ \alpha(\xi, S) &= \alpha(\xi, S_0) + \varepsilon S_1 \alpha'(\xi, S_0) + \dots, \\ \beta(\xi, S) &= \beta(\xi, S_0) + \varepsilon S_1 \beta'(\xi, S_0) + \dots, \\ \gamma(S) &= \gamma(S_0) + \varepsilon S_1 \gamma'(S_0) + \dots \end{aligned} \quad (2.26)$$

Inserting these expansions and incorporating the terms of the same order ε^i , we deduce the expansion flux expression :

$$\Phi(\xi, S) = \varepsilon^{-1} \Phi_{-1}(\xi, S_0) + \varepsilon^0 \Phi_0(\xi, S_0, S_1) + \varepsilon^1 \Phi_1(\xi, S_0, S_1, S_2) + \dots \quad (2.27)$$

As discussed in Section 2.1, the flow regime depends strongly on the capillary number N_c . There are four flow regimes :

1. *Capillary-dominant case* : $N_c \approx \mathcal{O}(1)$ ($N_c^* \approx \mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$ at micro-scale)
2. *Balance case* : $N_c \approx \mathcal{O}(\varepsilon)$ ($N_c^* \approx \mathcal{O}(1)$ at microscale)
3. *Gravity-driven case* : $N_c \approx \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ ($N_c^* \approx \mathcal{O}(\varepsilon)$ at micro-scale)
4. *Capillary-free case* : $N_c = 0$ ($N_c^* = 0$)

The capillary-free case has been studied both for the piecewise constant medium by a number of authors (Kaasschieter, 1999; Cunha et al., 2004; Hayek et al., 2009) and perfectly layered media by Mouche et al. (2010). We study here the two first flow regimes only, the capillary-dominant case and the balance case. The gravity-driven case is discussed in the Chapter 3.

2.3.1 Capillary-dominant case : $N_c \approx \mathcal{O}(1)$

The flux equations for different orders in ε are :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1} : \Phi_{-1}(\xi, S_0) &= -\beta(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi} = 0 \\ \varepsilon^0 : \Phi_0(\xi, S_0, S_1) &= \gamma(S_0) + \alpha(\xi, S_0) - \\ &\quad - \beta(\xi, S_0) \left(\frac{\partial S_0}{\partial z} + \frac{\partial S_1}{\partial \xi} \right) - S_1 \beta'(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

The saturation equations for different orders of ε are also easily derived :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-2} : \frac{\partial \Phi_{-1}}{\partial \xi} &= -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\beta(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi} \right), \\ \varepsilon^{-1} : \frac{\partial \Phi_{-1}}{\partial z} + \frac{\partial \Phi_0}{\partial \xi} &= -\frac{\partial}{\partial z} \left(\beta(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi} \right) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\gamma(S_0) + \alpha(\xi, S_0) - \beta(\xi, S_0) \left(\frac{\partial S_0}{\partial z} + \frac{\partial S_1}{\partial \xi} \right) - S_1 \beta'(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi} \right), \\ \varepsilon^0 : \frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_0}{\partial z} + \frac{\partial \Phi_1}{\partial \xi} &= 0. \end{aligned} \quad (2.29)$$

At the cell scale, the saturation function $S_i(z, \xi, t)$ is defined by :

$$S_i(z, \xi, t) = \begin{cases} S_i^-(z, \xi, t) & \text{on } (-1, 0), \\ S_i^+(z, \xi, t) & \text{on } (0, 1). \end{cases} \quad (2.30)$$

In the capillary-dominant case, the flux Φ_{-1} is equal to 0 (Mikelic et al., 2002). Therefore, we deduce from (2.28) that the saturation in the order ε^0 is constant in each layer (Mouche et al., 2010) :

$$S_0(z, \xi, t) = \begin{cases} S_0^-(z, t) & \text{on } (-1, 0), \\ S_0^+(z, t) & \text{on } (0, 1). \end{cases} \quad (2.31)$$

The discontinuous ε^0 -order flux functions in each cell are :

$$-1 < \xi < 0 :$$

$$\Phi_0^-(z, t) = \gamma(S_0^-) + k^- \Lambda(S_0^-) - N_c \sqrt{k^-} \Lambda(S_0^-) J'(S_0^-) \left(\frac{\partial S_0^-}{\partial z} + \frac{\partial S_1^-}{\partial \xi} \right), \quad (2.32)$$

$$0 < \xi < 1 :$$

$$\Phi_0^+(z, t) = \gamma(S_0^+) + k^+ \Lambda(S_0^+) - N_c \sqrt{k^+} \Lambda(S_0^+) J'(S_0^+) \left(\frac{\partial S_0^+}{\partial z} + \frac{\partial S_1^+}{\partial \xi} \right).$$

We deduce the gradient of S_1 in each layer :

$$\frac{\partial S_1^-}{\partial \xi} = \frac{\gamma(S_0^-) + k^- \Lambda(S_0^-) - \Phi_0^-(z, t)}{N_c \sqrt{k^-} \Lambda(S_0^-) J'(S_0^-)} - \frac{\partial S_0^-}{\partial z}, \quad (2.33)$$

and

$$\frac{\partial S_1^+}{\partial \xi} = \frac{\gamma(S_0^+) + k^+ \Lambda(S_0^+) - \Phi_0^+(z, t)}{N_c \sqrt{k^+} \Lambda(S_0^+) J'(S_0^+)} - \frac{\partial S_0^+}{\partial z}. \quad (2.34)$$

Integration of (2.33) over $[-1,0]$ and (2.34) over $[0,1]$ leads to :

$$S_1^-(0) - S_1^-(-1) = \int_0^1 \frac{\partial S_1^-}{\partial \xi} d\xi = \frac{\gamma(S_0^-) + k^- \Lambda(S_0^-) - \Phi_0^-(z, t)}{N_c \sqrt{k^-} \Lambda(S_0^-) J'(S_0^-)} - \frac{\partial S_0^-}{\partial z}, \quad (2.35)$$

and

$$S_1^+(1) - S_1^+(0) = \int_0^1 \frac{\partial S_1^+}{\partial \xi} d\xi = \frac{\gamma(S_0^+) + k^+ \Lambda^+(S_0^+) - \Phi_0^+(z, t)}{N_c \sqrt{k^+} \Lambda(S_0^+) J'(S_0^+)} - \frac{\partial S_0^+}{\partial z}. \quad (2.36)$$

Moreover, the ε^1 -order saturations in cells can be calculated from the continuity condition of capillary pressure at the interface $\xi = 0$ and its periodicity condition at the cell endpoints $\xi = \pm 1$. Continuity of capillary pressure reads :

$$\frac{J(S_0^- + \varepsilon S_1^-(0, z, t) + \dots)}{\sqrt{k^-}} = \frac{J(S_0^+ + \varepsilon S_1^+(0, z, t) + \dots)}{\sqrt{k^+}}, \quad (2.37)$$

and its expansion gives :

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 : \frac{J(S_0^-)}{\sqrt{k^-}} &= \frac{J(S_0^+)}{\sqrt{k^+}}, \\ \varepsilon^1 : S_1^-(0, z, t) \frac{J'(S_0^-)}{\sqrt{k^-}} &= S_1^+(0, z, t) \frac{J'(S_0^+)}{\sqrt{k^+}}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Capillary pressure periodicity condition reads :

$$\frac{J(S_0^- + \varepsilon S_1^-(-1, z, t) + \dots)}{\sqrt{k^-}} = \frac{J(S_0^+ + \varepsilon S_1^+(+1, z, t) + \dots)}{\sqrt{k^+}}, \quad (2.39)$$

and yields

$$\varepsilon^1 : S_1^-(-1, z, t) \frac{J'(S_0^-)}{\sqrt{k^-}} = S_1^+(+1, z, t) \frac{J'(S_0^+)}{\sqrt{k^+}}. \quad (2.40)$$

By incorporating (2.35), (2.36), (2.38) and (2.40), we obtain the relationship between $S_0^-(z, t)$, $S_0^+(z, t)$ and $\Phi_0(z, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{J'(S_0^-)}{\sqrt{k^-}} \left\{ \frac{\gamma(S_0^-) + k^- \Lambda(S_0^-) - \Phi_0^-(z, t)}{N_c \sqrt{k^-} \Lambda(S_0^-) J'(S_0^-)} - \frac{\partial S_0^-}{\partial z} \right\} &= \\ \frac{J'(S_0^+)}{\sqrt{k^+}} \left\{ \frac{\gamma(S_0^+) + k^+ \Lambda^+(S_0^+) - \Phi_0^+(z, t)}{N_c \sqrt{k^+} \Lambda(S_0^+) J'(S_0^+)} - \frac{\partial S_0^+}{\partial z} \right\}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Finally, the zeroth order upscaled flux function which is a function of ε^0 -order saturation in cells can be derived from Eq. (2.41) :

$$\begin{aligned} \Phi_0(z, t) &= \frac{2}{\frac{1}{k^- \Lambda(S_0^-)} + \frac{1}{k^+ \Lambda^+(S_0^+)}} \left\{ \frac{N_q}{2k^- k_{rw}(S_0^-)} + \frac{N_q}{2k^+ k_{rw}(S_0^+)} + 1 - \right. \\ &\quad \left. \frac{N_c}{2} \left(\frac{J'(S_0^-)}{\sqrt{k^-}} \frac{\partial S_0^-}{\partial z} + \frac{J'(S_0^+)}{\sqrt{k^+}} \frac{\partial S_0^+}{\partial z} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

The upscaled saturation equation reads :

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Phi}(\bar{S})}{\partial z} = 0, \quad (2.43)$$

where the upscaled saturation $\bar{S}(z, t)$ is defined as :

$$\bar{S}(z, t) = \frac{1}{2}(S_0^-(z, t) + S_0^+(z, t)), \quad (2.44)$$

and the upscaled flux function is given by :

$$\begin{cases} 0 \leq \bar{S} \leq \bar{S}^* : \bar{\Phi}(\bar{S}) = 0, \\ \bar{S}^* \leq \bar{S} \leq 1 : \bar{\Phi}(\bar{S}) = \underbrace{\bar{F}(\bar{S}) + \bar{G}(\bar{S})}_{\bar{c}(\bar{S})} - N_c \bar{D}(\bar{S}) \frac{\partial \bar{S}}{\partial z} . \end{cases} \quad (2.45)$$

The first term of Eq. (2.45) fulfills the capillary pressure continuity condition as discussed in Mouche et al. (2010). Here $\bar{S}^* = S^*/2$ where S^* is the threshold saturation implied by the entry pressure discontinuity at the interface between high and low permeability layers. The saturation S^* fulfills the condition :

$$\frac{J(S^*)}{\sqrt{k^+}} = \frac{J(0)}{\sqrt{k^-}}. \quad (2.46)$$

$S_0^+ < S^*$ yields to $S_0^- = 0$ and thus $\bar{S} \leq \bar{S}^* = S^*/2$, because the CO₂ cannot penetrate into the low-permeability layer. In this case, both $\bar{G}(\bar{S})$ and $\bar{F}(\bar{S})$ vanish. When S_0^+ exceeds the threshold saturation S^* , flow at macroscale occurs and the upscaled buoyancy flux function $\bar{G}(\bar{S})$ can be interpreted as the harmonic mean over cell of gravitational flux function :

$$\bar{G}(\bar{S}) = \frac{2}{\frac{1}{k^- \Lambda(S_0^-)} + \frac{1}{k^+ \Lambda(S_0^+)}}. \quad (2.47)$$

The upscaled viscous flux is

$$\bar{F}(\bar{S}) = N_g \cdot \frac{\frac{1}{k^- k_{rw}(S_0^-)} + \frac{1}{k^+ k_{rw}(S_0^+)}}{\frac{1}{k^- \Lambda(S_0^-)} + \frac{1}{k^+ \Lambda(S_0^+)}}. \quad (2.48)$$

The upscaled diffusivity function in Eq. (2.45) is given by :

$$\bar{D}(\bar{S}) = \bar{G}(\bar{S}) \frac{d\bar{P}_c(\bar{S})}{d\bar{S}}, \quad (2.49)$$

where the upscaled capillary pressure is

$$\bar{P}_c(\bar{S}) = \frac{J(S_0^-)}{\sqrt{k^-}} = \frac{J(S_0^+)}{\sqrt{k^+}}. \quad (2.50)$$

The upscaled convective flux $\bar{c}(\bar{S})$ in Eq. (2.45) is indeed the sum of the upscaled fractional flow $\bar{F}(\bar{S})$ obtained by Van Duijn et al. (2007) and the upscaled gravitational flow $\bar{G}(\bar{S})$ obtained by Mouche et al. (2010).

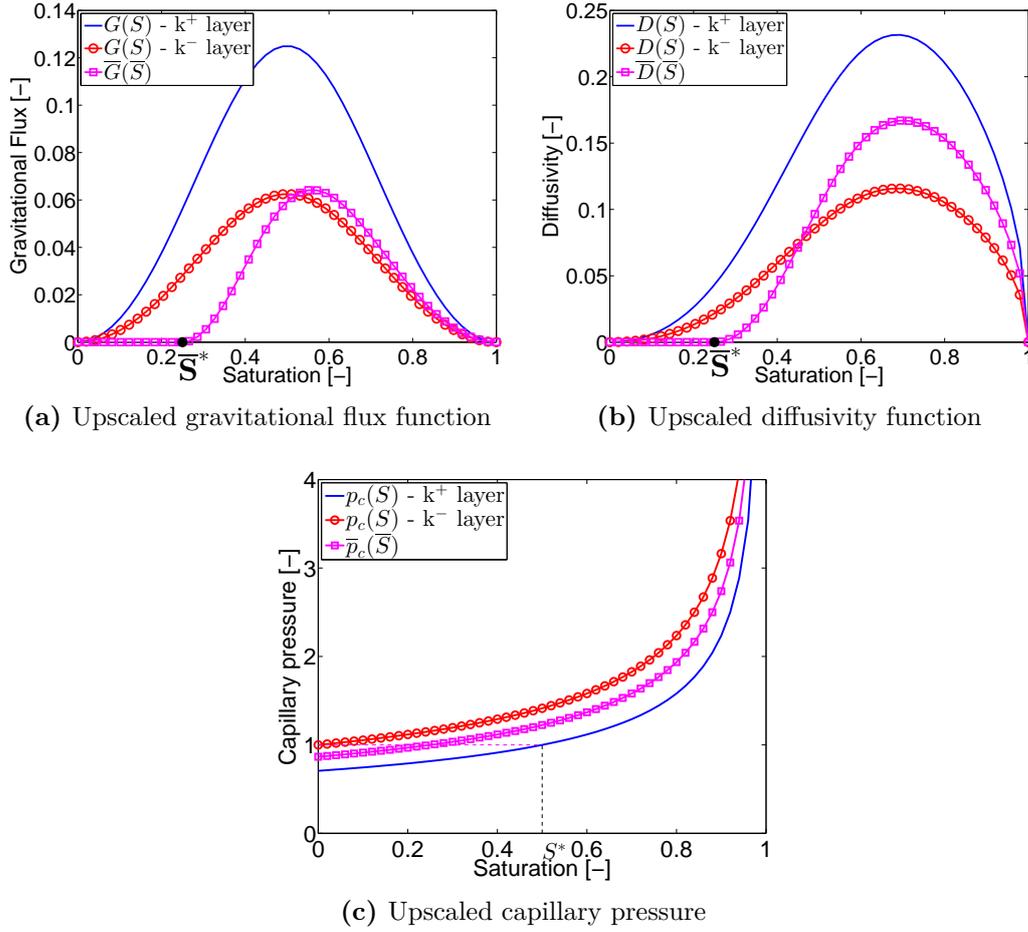


Figure 2.3 – Capillary-dominant case $N_c = \mathcal{O}(1)$: the upscaled gravitational function $\bar{G}(\bar{S})$, the diffusivity function $\bar{D}(\bar{S})$ and the upscaled capillary pressure function $\bar{P}_c(\bar{S})$ in the case $k^-/k^+ = 1/2$, the threshold saturation is $\bar{S}^* = 0.25$.

Figure 2.3a shows the upscaled gravitational flux function $\bar{G}(\bar{S})$ for the case $k^-/k^+ = 0.5$ which leads to a threshold saturation value $\bar{S}^* = 0.25$. The gravitational flux function is equal to 0 when $\bar{S} \leq \bar{S}^*$ or $\bar{S} = 1$. The upscaled diffusivity function in the case $k^-/k^+ = 0.5$ is represented in Figure 2.3b. Due to its direct proportionality with the gravitational flux function (2.49), diffusivity vanishes also when $\bar{S} \leq \bar{S}^*$ or $\bar{S} = 1$. The upscaled capillary pressure $\bar{P}_c(\bar{S})$ is plotted in Figure 2.3c.

Figure 2.4 shows the convective flux in the low-permeability and high-permeability layers and the upscaled one for $N_q = 0.1$ and $N_q = 1$. When $N_q = 0$, the convective flux contains the gravitational term only. Hence the upscaled convective flux becomes the flux plotted in Figure 2.3a. In both cases $N_q = 0.1$ and $N_q = 1$, the upscaled convective flux vanishes when $0 \leq \bar{S} \leq \bar{S}^*$. One can note that when $N_q = 1$, the convective flux is a monotone increasing function while it has a bell-shaped form for lower injection rates ($N_q = 0.1$).

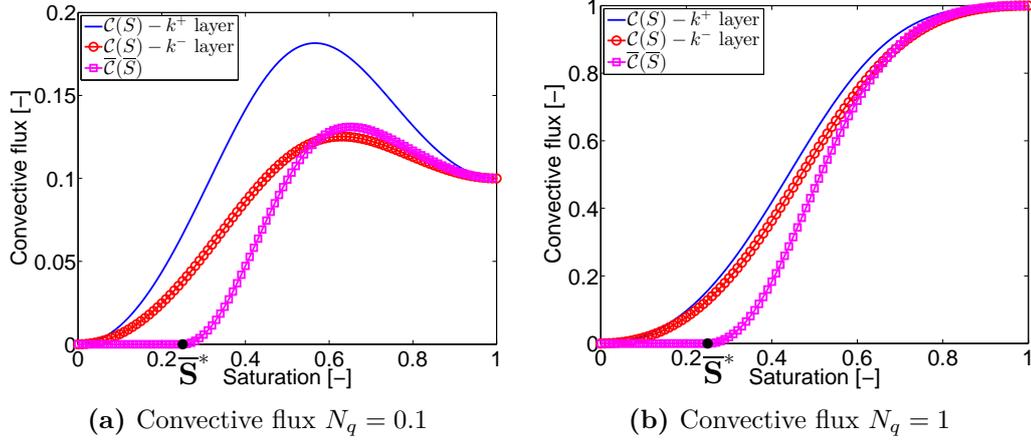


Figure 2.4 – Capillary-dominant case $N_c = \mathcal{O}(1)$: the effective convective flux function in the case $k^-/k^+ = 1/2$, the threshold saturation is $\bar{S}^* = 0.25$ for $N_q = 0.1$ (a) and $N_q = 1$ (b)

2.3.2 Balance case : $N_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$

2.3.2.1 Effective flux function

Let us write $N_c =: N_c^* \varepsilon$ with $N_c^* = \mathcal{O}(1)$. The CO₂ flux in Eq. (2.24) becomes :

$$\Phi(\xi, S) = \gamma(S) + \alpha(\xi, S) - \varepsilon \left(\frac{\partial S}{\partial z} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial S}{\partial \xi} \right) \beta^*(\xi, S), \quad (2.51)$$

with $\gamma(S), \alpha(\xi, S)$ defined in Eq. (2.25) and

$$\beta^*(\xi, S) = N_c^* \sqrt{k(\xi)} \Lambda(S) J'(S). \quad (2.52)$$

The flux equations are derived from the asymptotic expansion of Eq. (2.51) :

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 : \Phi_0(\xi, S_0) &= \gamma(S_0) + \alpha(\xi, S_0) - \beta^*(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi}, \\ \varepsilon^1 : \Phi_1(\xi, S_0, S_1) &= S_1 \gamma'(S_0) + S_1 \alpha'(\xi, S_0) - \beta^*(\xi, S_0) \left(\frac{\partial S_0}{\partial z} + \frac{\partial S_1}{\partial \xi} \right) - S_1 \beta^{*'}(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

The saturation equations at different orders in ε can be derived from Eq. (2.23) :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1} : \frac{\partial \Phi_0}{\partial \xi} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\gamma(S_0) + \alpha(\xi, S_0) - \beta^*(\xi, S_0) \frac{\partial S_0}{\partial \xi} \right) = 0, \\ \varepsilon^0 : \frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_0}{\partial z} + \frac{\partial \Phi_1}{\partial \xi} &= 0. \end{aligned} \quad (2.54)$$

The ε^{-1} equation in Eq. (2.54) means that Φ_0 does not depend on ξ : $\Phi_0 = \Phi_0(z, t)$. The zeroth order upscaled equation is obtained by averaging over the cell the ε^0 order equation in Eq. (2.54). The third term of this equation vanishes after integration over the cell due to the periodicity condition.

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial z} = 0. \quad (2.55)$$

where $\bar{S} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} S_0(\xi, z, t) d\xi$ and $\bar{\Phi} = \Phi_0(z, t)$.

2.3.2.2 Numerical implementation

Since the first equation of (2.54) is a non linear differential equation without explicit solution, the effective flux function $\bar{\Phi} = \Phi_0(z, t)$ must be derived numerically. As discussed in Mikelic et al. (2002) in the case where gravity is absent, a table of values of the pair $(\bar{S}, \bar{\Phi})$ has to be constructed. Nevertheless, the computation of the effective flux function when taking into account gravity effect requires more attention because of the "bell-shaped" form of the gravitational flux $\alpha(S_0)$. For a given value of $\bar{\Phi}$, there are two values of \bar{S} , each corresponding to one of the branch of the gravitationnal flux curve.

The saturation S_0 is solution of the equation :

$$N_q \cdot f(S_0) + k(z)\Lambda(S_0) \left(1 - \frac{N_c^*}{\sqrt{k(z)}} J'_s \frac{\partial S_0}{\partial z} \right) = \bar{\Phi}. \quad (2.56)$$

The solution of (2.56) must satisfy the cell problem (\mathcal{P}) which consist of the continuity conditions at the interface $\xi = 0$:

$$\begin{cases} \text{if } 0 \leq S_0(0^-) \leq S_0^* : S_0(0^+) = 0, \\ \text{if } S_0^* \leq S_0(0^-) \leq 1 : \frac{J(S_0(0^-))}{\sqrt{k^+}} = \frac{J(S_0(0^+))}{\sqrt{k^-}} \end{cases} \cdot \quad (2.57)$$

and the periodicity condition at two medium endpoints $\xi = \pm 1$:

$$\begin{cases} \text{if } 0 \leq S_0(-1^+) \leq S_0^* : S_0(1^-) = 0, \\ \text{if } S_0^* \leq S_0(-1^+) \leq 1 : \frac{J(S_0(-1^+))}{\sqrt{k^+}} = \frac{J(S_0(1^-))}{\sqrt{k^-}}, \end{cases} \cdot \quad (2.58)$$

We applied the shooting procedure proposed in Mikelic et al. (2002). It means that for a given $S_0(-1)$ value which ranges from 0 to 1, we have to find $\bar{\Phi}$ such that the solution of Eq. (2.56) satisfies the matching and the periodicity conditions given in Eq. (2.57) and Eq. (2.58) respectively. The shooting procedure is the following :

-
1. Choose $S_0(-1) \geq 0$ and use this value as the initial condition for (2.56) on $(-1, 0)$.
 2. Let $\bar{\Phi}$ increases from 0 with an increment $\Delta\bar{\Phi}$ small enough. With a given $\bar{\Phi}$, the $S_0(-1)$ yields the corresponding $S_0(0^-)$ and, by the periodicity conditions Eq. (2.58), $S_0(1)$. Use this value as the initial condition for (2.56) on $(0, 1)$ to find $S_0(0^+)$.
 3. Adjust $\bar{\Phi}$ such that $S_0(0^-)$ and $S_0(0^+)$ satisfy the matching condition.
-

Figure 2.5 shows the numerical effective flux function $\bar{\Phi}(\bar{S})$ for the balance case $N_c = \varepsilon$ where $k^-/k^+ = 1/2$ and for three values of $N_q \in \{0, 0.1, 1\}$. The small scale capillary effect have been encapsulated in the effective flux function through the resolution of the cell problem (2.56). One can notice the effect of the injection rate on the form of the effective flux function. In the no-injection and low-injection cases ($N_q = 0$ or 0.1), the effective flow is a *bell-shaped* function (Figures 2.5a, 2.5b) as well as it is a monotone increasing function in the last case (Figure 2.5c). For the latter, the curve $\bar{\Phi}(\bar{S})$ is very close to the convective flow curve in the low permeability layer.

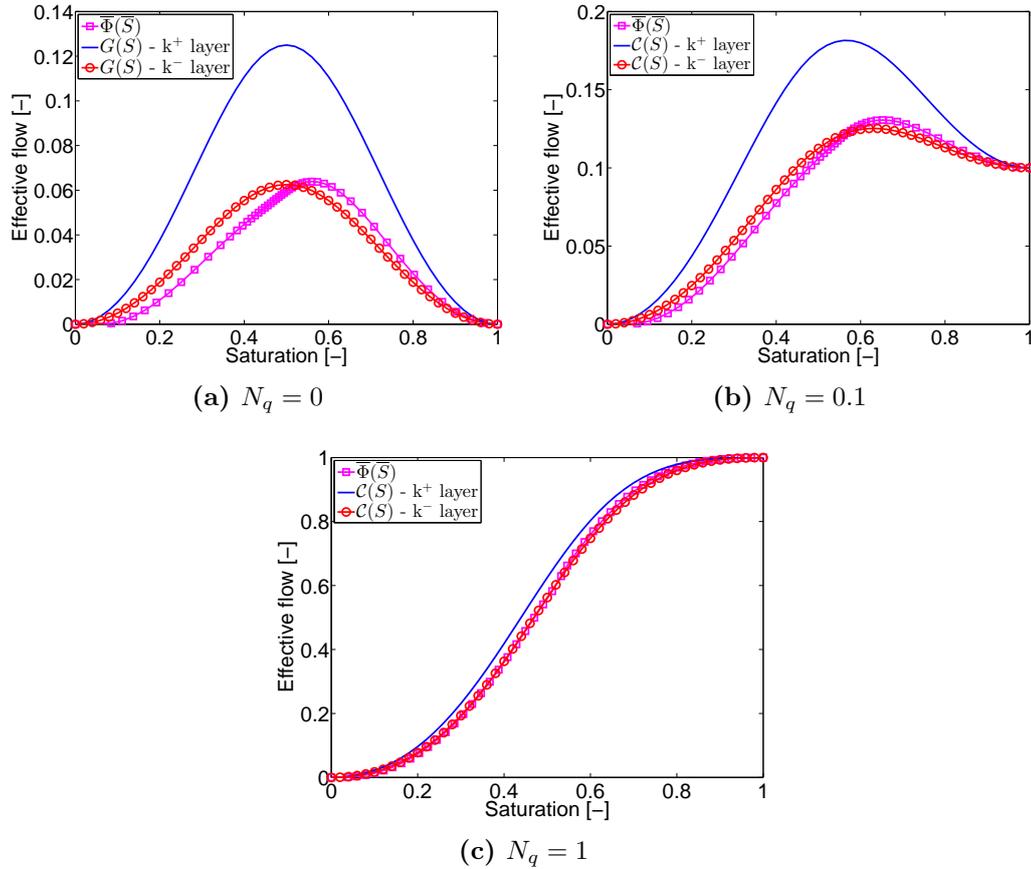


Figure 2.5 – Balance case $N_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$: the effective flux function in the case $k^-/k^+ = 1/2$ with three values of N_q : $N_q = 0$ (a), $N_q = 0.1$ (b) and $N_q = 1$ (c).

2.4 Validation of upscaled models

In this section, we compare the upscaled models presented in Section 2.3 with the small-scale numerical simulations. The simulations are performed with a home-made code based on an explicit Eulerian Godunov discretization scheme and the algorithm developed in Cances (2008) to treat capillary pressure discontinuities. This code solves directly the saturation equation (2.14) and the flux and capillary pressure continuity equations at the interfaces between layers.

Three flow situations are studied : (i) two-phase CO_2 -brine countercurrent flow with a CO_2 saturation imposed at the bottom of the column , *i.e.* the column is in contact with a CO_2 reservoir ; (ii) two-phase CO_2 -brine countercurrent flow with an initial CO_2 saturation distribution in the column, and (iii) CO_2 injection at the bottom of the column. In all three cases, a no-flow boundary condition is prescribed for the top of the column. The bottom is also no-flow boundary in the second case.

The small expansion parameter is set to $\varepsilon = 1/40$ for the case (i) and $\varepsilon = 1/80$ for the last two cases, (ii) and (iii). The ratio between the layers permeabilities is k^-/k^+

$=1/2$. The three cases described above are studied in the two next sections for $N_c \approx 1$, capillary-dominant case and $N_c \approx \varepsilon$, balance case. When CO₂ is injected, case (iii), only the low injection rate value case N_q is considered.

2.4.1 Capillary-dominant case

i. Constant imposed CO₂ saturation

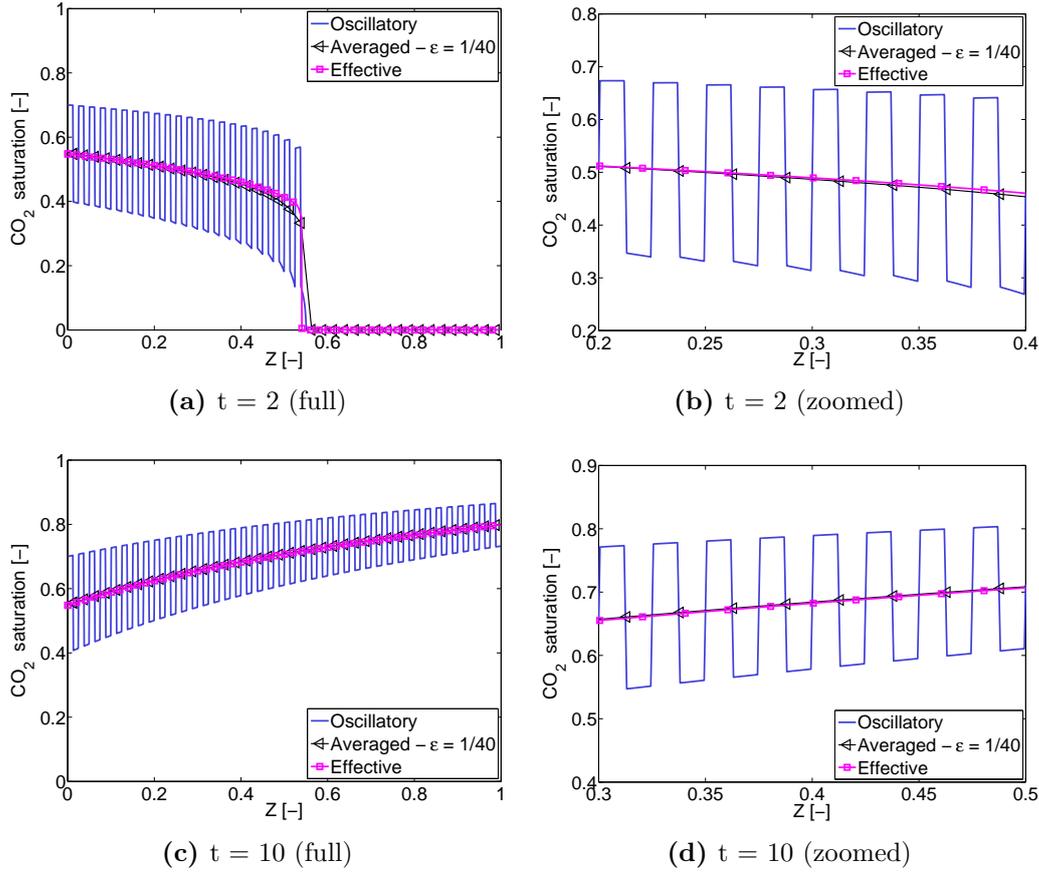


Figure 2.6 – Capillary-dominant case - imposed CO₂ saturation at the bottom of the column : CO₂ saturation distribution at time $t = 2$ (top) and $t = 10$ (bottom) with $\varepsilon = 1/40$, full (left) and zoomed view (right).

For the first case of countercurrent flow an imposed saturation $S_{0,fs} = 0.7$ is prescribed at the bottom of the column for the fine scale simulations. The corresponding imposed saturation for the upscaled simulation is calculated from the cell-averaged solution of the cell problem (\mathcal{P}) (Eqs. (2.57) and (2.58)), hence, $S_{0,ups} = 0.56$. Figure 2.6 shows the CO₂ saturation spatial evolution before the CO₂ front reach the top of the column, $t = 2$ (top), and after it has reached the top, $t = 10$ (bottom). The no-flux condition at the top of the column leads to a back-flow downward.

The solution of the fine scale problem in Figure 2.6 shows a good agreement with the theoretical results : the profile is highly oscillatory on the macro scale (Figures 2.6a and 2.6c) and quite flat within the micro structure (Figures 2.6b and 2.6d). This is due to the predominance of capillary diffusion. One can observe on Figure 2.6a a shock at the front of the CO₂ profile at short time for $\bar{S} < 0.35$. The absence of capillary diffusion at the front is explained by the compartment of the upscaled diffusivity which is zero for $\bar{S} \leq 0.25$ (Figure 2.3b). When CO₂ reaches the top of column, the two solutions match very well (Figure 2.6c). Because of the strong capillary diffusion the saturation at the top boundary is much lower than 1 and there is no backward shock as in the capillary-free case (Mouche et al., 2010). This is indeed due to the high capillary diffusivity value when the upscaled saturation \bar{S} lies in the range $[0.6, 0.8]$ (Figure 2.3b).

ii. Dynamics of a CO₂ plume

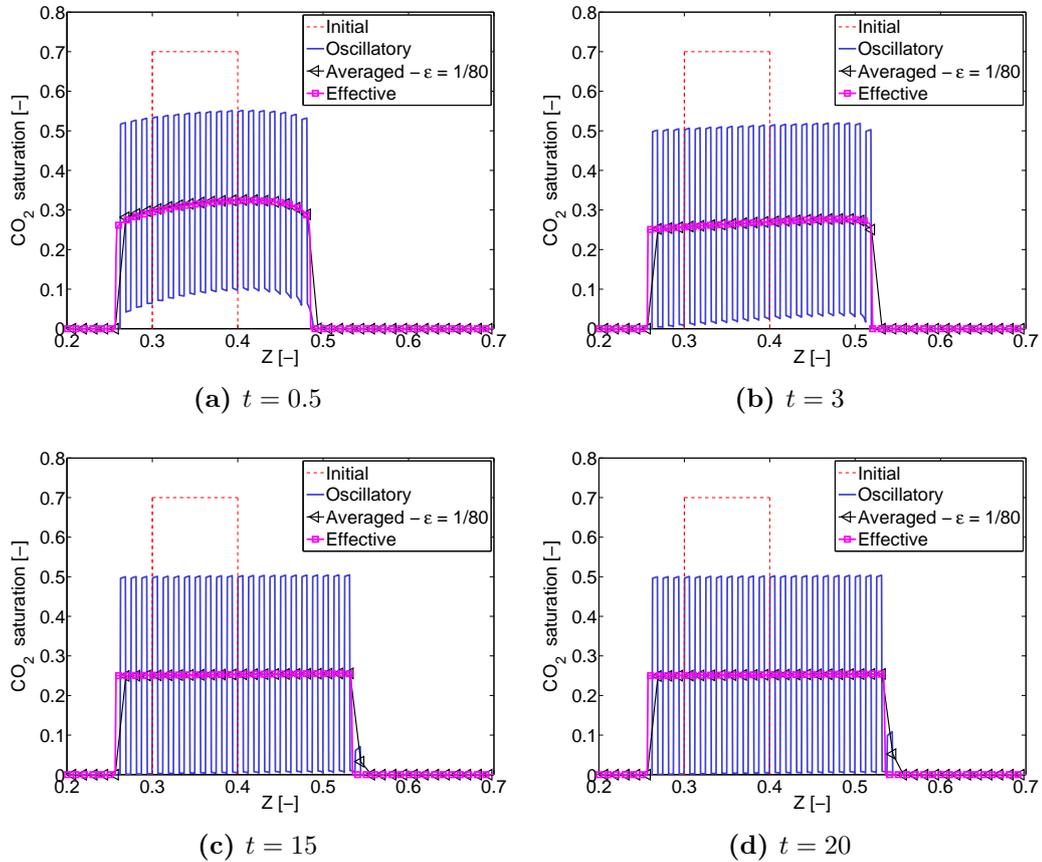


Figure 2.7 – Capillary-dominant case - CO₂ plume : CO₂ saturation distribution at time $t = 0.5$ (a), $t = 3$ (b), $t = 0.5$ (c) and $t = 20$ (d).

In the second case of countercurrent flow, a CO₂ plume is located initially between $z_1 = 0.3$ and $z_2 = 0.4$ with an initial saturation $S_0 = 0.7$. The remaining zone of the domain is filled with brine. Figure 2.7 shows the temporal evolution of the CO₂ saturation at $t = 0.5$, $t = 3$, $t = 15$ and $t = 20$. Due to gravity effect, the CO₂ mainly rises upwards. Only a small amount of CO₂ bubble is displaced downwards due to both gravity and ca-

pillary diffusion. One can observe that after a long time, the CO₂ plume tends to steady state, which is expressed by the similar saturation profiles at $t = 15$ and $t = 20$. This phenomenon is indeed the capillary trapping. When the saturations at the rear and the front of the plume reach the threshold value \bar{S}^* the plume does not migrate anymore, the plume is trapped by capillarity. This macroscale trapping effect has been studied by Mikelic et al. (2002) for the horizontal column case and Saadatpoor et al. (2010) for the migration in random heterogeneous media. The effective solution and the cell-averaged solution of the fine-scale simulation are in fairly good agreement, except at the rear and front of the profile where the solution is no more periodic. This discrepancy disappears when $\varepsilon \rightarrow 0$.

iii. CO₂ injection

Let us consider the case where CO₂ is injected at the bottom of the vertical column initially saturated by brine. We investigate only the low-injection case $N_q = 0.1$ and suppose that the upper boundary is located far away from the injection point, thus boundary effect on flow is disregarded. Both capillary pressure and gravity force are taken into account into the transport process.

A comparison between the averaged CO₂ saturation at small scale and the effective saturation is presented in the Figure 2.8. It shows a good agreement between the numerical result of the full problem and the semi-analytical solution. The effective saturation profile fits well with the cell-averaged saturation, except at the CO₂ front. Note that when ε tends to zero, the numerical curve should tend to the effective solution at the front of the CO₂ profile.

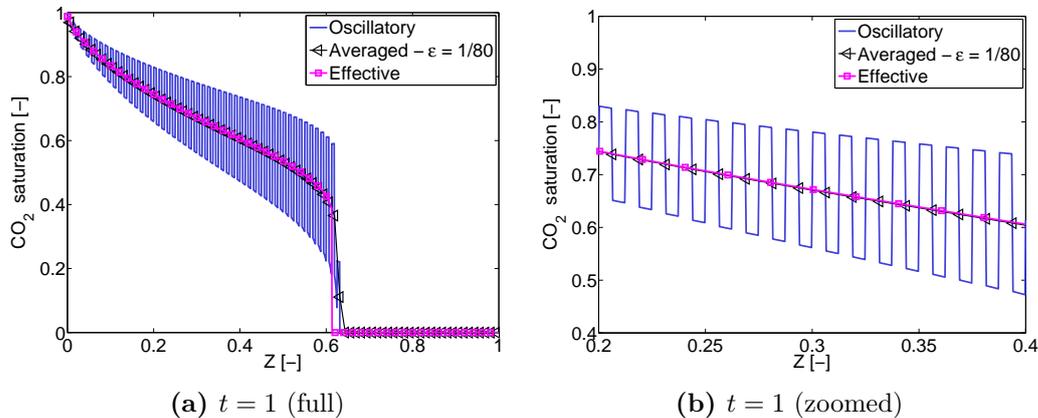


Figure 2.8 – Capillary dominant case - CO₂ injection : CO₂ saturation distribution at time $t = 1$, full (a) and zoomed view (b).

2.4.2 Balance case

For the balance case a macroscale Buckley-Leverett problem with gravity is recovered. The upscaled flux function is shown in Figure 2.5a.

i. Constant imposed CO₂ saturation

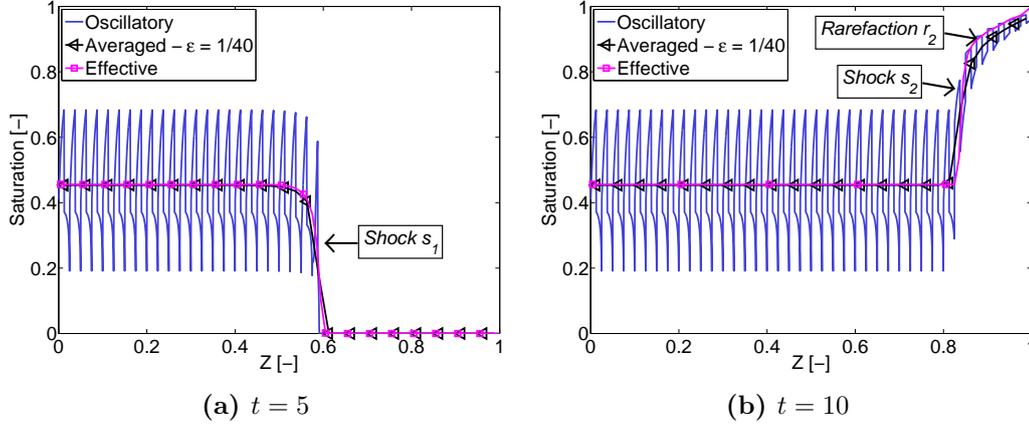


Figure 2.9 – Balance case - imposed CO₂ saturation at the bottom of the column : CO₂ saturation distribution at time t = 5 (a) and t = 10 (b).

The imposed saturations at the bottom of the column for the fine scale and macro scale simulations are $S_{0,fs} = 0.4$ and $S_{0,ups} = 0.45$. Figure 2.9 shows the CO₂ saturation profiles at t = 5 (a) and t = 10 (b) after the CO₂ has reached to the top of column with a backflow downward. Since the capillary force is weak, $N_c \approx \mathcal{O}(\varepsilon)$, the CO₂ saturation profile within the micro-structure of the fine-scale simulation is more oscillatory than in the capillary dominant case. This oscillatory compartment accounts for the CO₂ stratification beneath each low permeability layer due to capillarity. The cell-averaged saturation profile of the fine scale problem and the macro scale solution are in good agreement.

At macroscale, the problem in the equivalent homogeneous medium exhibits two Riemann problems : the first one localized at the inlet of medium, $z = 0$ with the upstream state $S_u = \lim_{z \rightarrow 0^-} S(z, t_0) = \bar{S}_0$ and downstream state $S_d = \lim_{z \rightarrow 0^+} S(z, t_0) = 0$. The second one occurs when CO₂ reached the top of the column with $S_u = \lim_{z \rightarrow 1^-} S(z, t_1) = 1$ and $S_d = \lim_{z \rightarrow 1^+} S(z, t_1) = \bar{S}_0$. The first Riemann problem comes from the imposed saturation value of the upscaled simulation $\bar{S}_0 = 0.45$ which is less than the saturation at the tangent point (or Welge's saturation) of the effective flux function $\bar{S}_W \approx 0.49$. The distribution of CO₂ effective saturation is consequently described only by the shock s_1 . No rarefaction wave has been observed in this test case. This can be explained by Figure 2.10 with the concave hull made by a straight line between 0 and \bar{S}_0 .

Once the CO₂ plume has reached the top of column, one can remark a fairly good agreement between the cell-averaged saturation of small scale simulation and the effective saturation in the Figure 2.9 (right). The CO₂ saturation profile is described by the rarefaction wave r_1 from $\bar{S} = 1$ to $\bar{S} = \bar{S}_1$ and then by a reflected shock s_2 between \bar{S}_1 and \bar{S}_0 . The shock s_2 travels with a velocity equal to the slope of the straight line connecting $\bar{S} = 1$ and $\bar{S} = \bar{S}_0$.

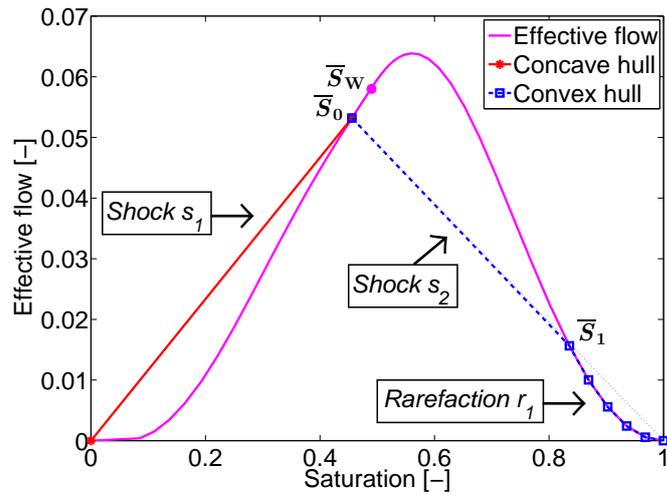


Figure 2.10 – Balance case - imposed CO₂ saturation at the bottom of the column : construction of the concave and convex hull for effective flux function with $N_c = \varepsilon$ and $k^-/k^+ = 1/2$

ii. Dynamics of a CO₂ plume

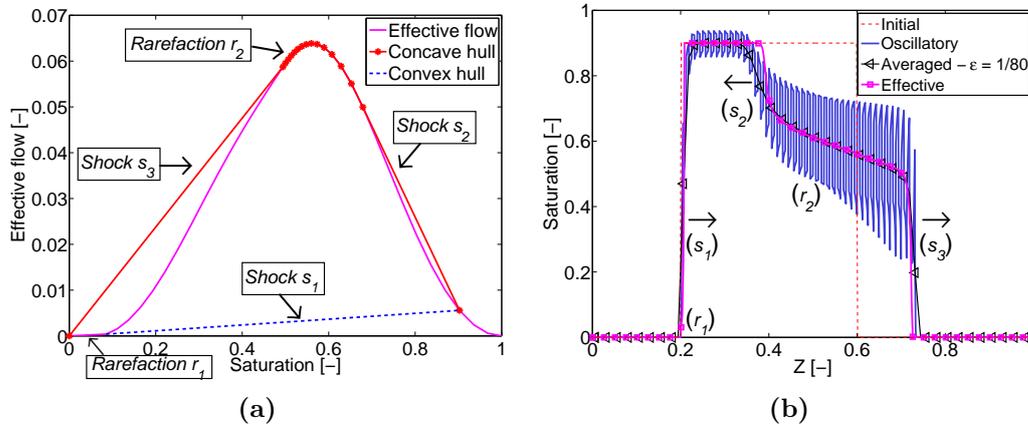


Figure 2.11 – Balance case - CO₂ plume : (a) Construction of the concave and convex hull for effective flux function. (b) Evolution of CO₂ plume in stratified medium and the equivalent homogeneous medium at $t=1$.

Let us consider the dynamics of a CO₂ plume which is initially located between $z = 0.2$ and $z = 0.6$ with an initial saturation $\bar{S}_i = 0.9$. The remaining zone is saturated with brine. Again two Riemann problems must be considered to interpret the upscaled saturation profile. The first one locates at $z = 0.2$ with the upstream state $S_u = 0$ and downstream state $S_d = \bar{S}_i$. The second one happens at $z = 0.6$ with $S_u = \bar{S}_i$ and $S_d = 0$. The solution of the first Riemann problem is graphically represented by convex hull of the flux function which contains a rarefaction wave r_1 and a shock s_1 both traveling

upward. For the second problem, the concave hull gives two shocks s_2 and s_3 traveling in opposite directions, separated by a rarefaction wave r_2 (see Figure 2.11a).

The comparison between the small scale and the upscaled saturation profile is shown in Figure 2.11b. The effective profile fits well with the small scale simulation result except that the shape of backward shock s_2 is smoothed as if there was some capillary diffusion. This effect is due to the finite value of ε and vanishes when this small parameter tends to zero.

iii. Injection case

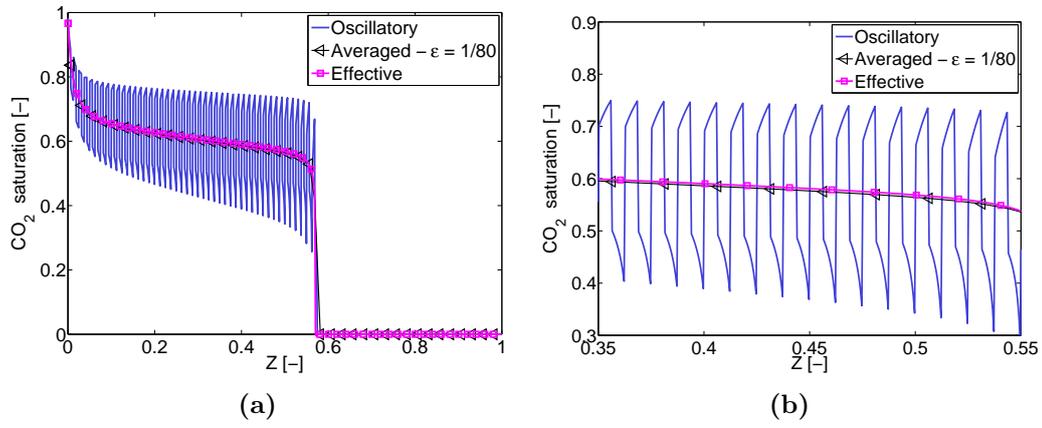


Figure 2.12 – Balance case - low CO₂ injection : CO₂ saturation distribution at time $t = 2.5$, full (left) and zoomed view (right).

In the last set-up, we study the low-injection case ($N_q = 0.1$) under the assumption that gravity and capillarity forces balance on microscale $N_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$. The macroscale Buckley-Leverett problem with gravity must be resolved. The same configuration with the case 2.1 is used except the N_c value. The CO₂ saturation equation is computed from Eq. (2.55) with the numerical effective convective flux obtained in the section 2.3.2.2.

Figure 2.12 shows the result of the upscaled equation and the cell-average of the solution of the fine-scale simulation solution at $t = 2.5$. The CO₂ saturation profile at both scales is highly oscillatory. Small diffusivity results in the high saturation variation within sub-layers. One can remark a good agreement between the semi-analytical upscaled solution and the fine-scale simulation result.

The concave hull of the effective flux function is built and depicted in Figure 2.13a. The concave hull contains two shocks s_1 and s_2 , which are indeed two tangents of the effective flux function, linked by the rarefaction r_1 .

The trajectory of a saturation \bar{S} which belongs to the rarefaction wave r_1 can be given by the method of characteristics (Bear and Bachmat, 1990) : $z_S = z_S(0) + \bar{\Phi}'(\bar{S})t$. The shock s_2 propagates with a velocity equal to the slope of the straight line which connects

the Welge's saturation \bar{S}_W and $\bar{S} = 0$. The traveling velocity v_{s_2} of the shock s_2 is estimated at 0.2 from Figure 2.13a which can be verified in temporal evolution of CO₂ saturation in Figure 2.13b.

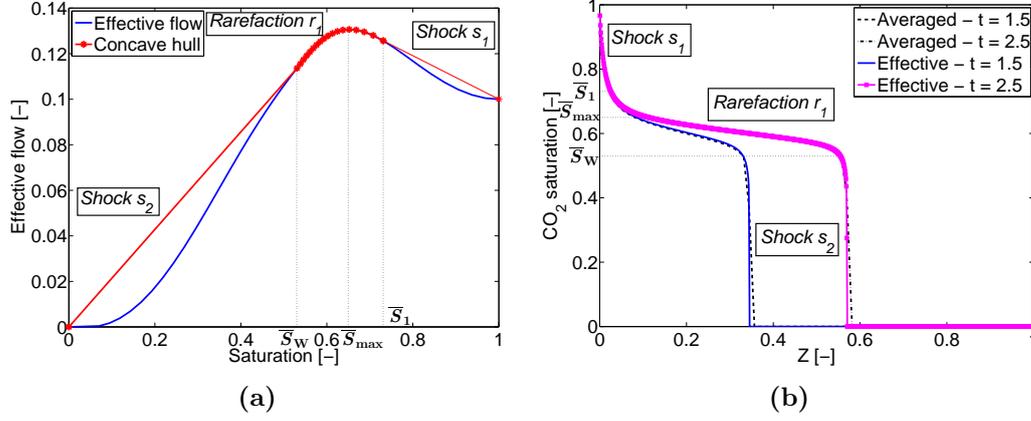


Figure 2.13 – Balance case - CO₂ injection : construction of the concave hulls (a) and CO₂ saturation profile on macroscale at $t = 1.5$ and $t = 2.5$.

2.5 Summary and conclusions

We have derived an upscaled model of CO₂ vertical migration in a periodic layered medium. Influence of viscous, gravity and capillary forces are taken into account.

Based on the value of the capillary number N_c , we consider two flow regimes : (i) capillary-dominant case, $N_c = 1$, where the capillarity is the driving force and (ii) balance case where the capillarity and gravity forces are in the same order of magnitude within microstructure.

In the capillary-dominant case, the effective functions can be seen as weighted harmonic means of the corresponding small scale ones. In the balance case, the capillary diffusion term disappears during the homogenization processes and the convective flux function must be derived numerically.

The upscaled models have been validated by considering two types of the CO₂ displacement : the countercurrent flow of a CO₂ plume ($N_q = 0$) and the CO₂ migration nearby the injection well ($N_q \neq 0$). In both cases, the upscaled saturation matches well with the cell averaged saturation. The analytical results obtained by the homogenization method capture well the shock velocity which allows us to estimate the time required for CO₂ plume to reach the top of the reservoir.

The next step of this work would be to consider the buoyancy-driven case, $N_c = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$. Although the effective functions in this case could be determined numerically in a similar way as in the balance case $N_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$, one expects to again address a problem of

local CO₂ stratification underneath low permeability layer. Another extension direction of this work is to study 2D two-phase (CO₂-brine) flow in non-perfectly periodic layered media using the homogenization method.

Bibliographie

- Bear, J. and Bachmat, Y. (1990). *Introduction to modeling of transport phenomena in porous media*, volume 4. Springer Science & Business Media.
- Bensoussan, A., Lions, J.-L., and Papanicolaou, G. (1978). *Asymptotic analysis for periodic structures. Studies in mathematics and its applications.*, volume 374. Elsevier Science Ltd.
- Bickle, M., Chadwick, A., Huppert, H. E., Hallworth, M., and Lyle, S. (2007). Modelling carbon dioxide accumulation at sleipner : Implications for underground carbon storage. *Earth and Planetary Science Letters*, 255(1) :164–176.
- Bolster, D., Neuweiler, I., Dentz, M., and Carrera, J. (2011). The impact of buoyancy on front spreading in heterogeneous porous media in two-phase immiscible flow. *Water Resources Research*, 47(2) :n/a–n/a.
- Brooks, R. and Corey, A. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Papers, Colorado State Universit.*
- Cances, C. (2008). *Two-phase flows in heterogeneous porous media : modeling and analysis of the flows of the effects involved by the discontinuities of the capillary pressure.* PhD thesis, Université de Provence - Aix - Marseille I.
- Cavanagh, A. J. and Haszeldine, R. S. (2014). The sleipner storage site : Capillary flow modeling of a layered CO₂ plume requires fractured shale barriers within the utsira formation. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 21(0) :101 – 112.
- Cunha, M., Santos, M., and Bonet, J. (2004). Buckley–leverett mathematical and numerical models describing vertical equilibrium process in porous media. *International journal of engineering science*, 42(11) :1289–1303.
- Doughty, C. (2007). Modeling geologic storage of carbon dioxide : comparison of non-hysteretic and hysteretic characteristic curves. *Energy Conversion and Management*, 48(6) :1768–1781.
- Eichel, H., Helmig, R., Neuweiler, I., and Cirpka, O. (2005). Upscaling of two-phase flow processes in porous media. In Das, D. and Hassanizadeh, S., editors, *Upscaling Multiphase Flow in Porous Media*, pages 237–257. Springer Netherlands.
- Hayek, M., Mouche, E., and Mügler, C. (2009). Modeling vertical stratification of CO₂ injected into a deep layered aquifer. *Advances in Water Resources*, 32(3) :450 – 462.
- Kaasschieter, E. (1999). Solving the buckley-leverett equation with gravity in a heterogeneous porous medium. *Computational Geosciences*, 3(1) :23–48.
- Michael, K., Golab, A., Shulakova, V., Ennis-King, J., Allinson, G., Sharma, S., and Aiken, T. . (2010). Geological storage of CO₂ in saline aquifers—a review of the experience from existing storage operations. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 4(4) :659–667.
- Mikelic, A., van Duijn, C., and Pop, I. (2002). Effective equations for two-phase flow with trapping on the micro scale. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 62(5) :1531–1568.

- Mouche, E., Hayek, M., and Mügler, C. (2010). Upscaling of CO₂ vertical migration through a periodic layered porous medium : The capillary-free and capillary-dominant cases. *Advances in Water Resources*, 33(9) :1164 – 1175.
- Nordbotten, J. M., Celia, M. A., and Bachu, S. (2005). Injection and storage of CO₂ in deep saline aquifers : Analytical solution for CO₂ plume evolution during injection. *Transport in Porous media*, 58(3) :339–360.
- Panfilov, M. and Floriat, S. (2004). Nonlinear two-phase mixing in heterogeneous porous media. *Transport in porous media*, 57(3) :347–375.
- Philippe, J.-B. and René, D. (2003). Potentiel des méthodes de séparation et stockage du CO₂ dans la lutte contre l'effet de serre. *Comptes rendus. Géoscience*, 335(6-7) :611–625.
- Riaz, A., Tchelepi, H. A., et al. (2008). Dynamics of vertical displacement in porous media associated with CO₂ sequestration. *SPE Journal*, 13(03) :305–313.
- Saadatpoor, E., Bryant, S. L., and Sepehrnoori, K. (2010). New trapping mechanism in carbon sequestration. *Transport in porous media*, 82(1) :3–17.
- Sánchez-Palencia, E. (1980). *Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127. Springer-Verlag Berlin.
- Shvidler, M. and Levi, B. (1970). One-dimensional filtration of immiscible fluids. *Nedra, Moscow*.
- Siddiqui, F. I. and Lake, L. W. (1997). A comprehensive dynamic theory of hydrocarbon migration and trapping. In *SPE annual technical conference*, pages 395–410.
- Silin, D., Patzek, T., and Benson, S. (2009). A model of buoyancy-driven two-phase countercurrent fluid flow. *Transport in Porous Media*, 76(3) :449–469.
- Szymkiewicz, A., Helmig, R., and Kuhnke, H. (2011). Two-phase flow in heterogeneous porous media with non-wetting phase trapping. *Transport in porous media*, 86(1) :27–47.
- Van Duijn, C. J., Eichel, H., Helmig, R., and Pop, I. S. (2007). Effective equations for two-phase flow in porous media : the effect of trapping on the microscale. *Transport in porous media*, 69(3) :411–428.
- Van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, 44(5) :892–898.

Chapitre 3

Buoyant flow of CO₂ through a semi-permeable layer of finite extent

Science never solves a problem without creating ten more.

George Bernard Shaw

Sommaire

3.1	Introduction	40
3.2	Two-phase incompressible, immiscible flow model	41
3.3	One-dimensional piecewise homogeneous porous medium	43
3.4	Single horizontal layer of finite extent	52
3.5	Conclusion	65
3.6	Appendix - Steady state gravity current under semi-permeable barrier fed by an an uniformly distributed source term for the capillary-free case	67
3.7	Application of gravity current model in the 1D case	68
	Bibliographie	70

3.1 Introduction

Geological storage of carbon dioxide is considered as a pragmatic solution for mitigation of global warming by reducing CO₂ emissions from large and concentrated sources. CO₂ is expected to be stored into the reservoir over a very long time periods by four basic trapping mechanisms : structural or stratigraphic, residual, solubility and mineral trapping. The first mechanisms, structural or stratigraphic trapping, are dominant mechanisms in terms of CO₂ trapped volume compared to the other ones during an injection process of several decades. The other three trapping mechanisms might have a quantitative contribution at larger time scales. Among them, residual trapping plays an important role in medium-term post-injection immobilization of CO₂ (Matanovic, 2013; Saadatpoor et al., 2010). An attractive way to enhance residual trapping is the "inject low and let rise" strategy in which CO₂ is injected into the bottom part of the formation (Saadatpoor et al., 2010; Kumar et al., 2005). Once injected into reservoir, supercritical CO₂, which is in general less dense than surrounding brine, will rise upwards due to buoyancy effect. During the movement upwards, CO₂ encounters horizontal low-permeability shale layers along which CO₂ spreads and continues to rise towards the top of reservoir through the leaks between these barriers.

The buoyant migration of CO₂ in heterogeneous reservoirs is usually studied using the gravity current approach. This approach is based on the assumption that the CO₂ and brine segregate due to their density difference. Therefore, the injected CO₂ and the surrounding fluid are supposed to be separated by a macroscopically sharp interface and the zone occupied by each fluid is saturated with this phase. The CO₂ pressure in the CO₂ lenses spreading beneath low permeability layers can be assumed to be hydrostatic (Hesse and Woods, 2010; Nordbotten et al., 2005; Huppert and Woods, 1995). Although the sharp-interface model gives a good prediction of the evolution of the current height in heterogeneous reservoirs at a very large scale, its results are strictly valid when the phase segregation is complete. The sharp-interface model is not able to take into account the reduction of relative permeability due to low saturations within the current which could significantly affect the spreading velocity of the current. In addition, neglecting the capillary pressure may lead to non-physical phenomena (Andreianov and Cances, 2013). Capillarity pressure tends to disperse and dilute the CO₂ gravity current beneath impermeable barriers. This leads to an increase of the CO₂ volume in contact with the reservoir rock as well as surrounding water and therefore enhances CO₂ dissolution and mineral trapping (Golding et al., 2011). Furthermore, in the case of gravity current along a low permeability boundary, capillarity creates a barrier, which prevents flow from high permeability matrix to the low permeability layers. This barrier takes place when the capillary pressure at the interface is lower than the entry capillary pressure of the low permeability layer (Mouche et al., 2010; Mikelic et al., 2002; Van Duijn et al., 2007).

The problem becomes even more complex when layers are semi-permeable so that CO₂ may migrate through the layers both by capillarity and gravity. At each interface between the matrix and the layers, both the capillary pressure and the total flux which consists of the viscous, buoyant and capillary fluxes must be continuous (Mouche et al., 2010). Different works are devoted to the study of two-phase capillary-dominant flow in heterogeneous porous media. Most of them address the one dimensional problem, *i.e.* in a horizontal or a vertical column (Mouche et al., 2010; Mikelic et al., 2002; Van Duijn

et al., 2007). All the works in two dimensions assume impervious layers or layers with a drainage term (Pritchard et al., 2001; Neufeld and Huppert, 2009). Assuming that flow is dominated by capillary force, Cavanagh and Haszeldine (2014) proposed recently to model the stratification of CO₂ beneath the horizontal shale layers of the Utsira formation at Sleipner sequestration site using the invasion percolation theory. This assumption requires a fairly high capillary number corresponding to a high injection rate which is not our case of interest.

The present paper focuses on the relative impact of gravity and capillarity on the dynamics of gravity-dominant CO₂ migration within a simplified heterogeneous media which consists in a single semi-permeable horizontal layer of finite extent embedded in a high permeability matrix initially saturated with brine.

In a first step, the local problem at the interface between two layers is considered. We consider in § 3.3 the CO₂ migration at the interface of a 1D piecewise constant homogeneous media. The two continuity conditions of capillary pressure and total flux allow to determine the saturation traces on each side of the interface at steady state. Based on the work of Andreianov and Cances (2013), we show graphically how to find the solution from the gravitational flux and capillary pressure curves.

The study of the one dimensional piecewise constant homogeneous media helps to consider in § 3.4 the migration of CO₂ injected into a two-dimensional medium with an embedded single permeable inclusion. We propose a new extension of the gravity current model to the case of a semi-permeable inclusion of finite extent taking into account, or not, capillary pressure. We discuss how the leakage flux through the inclusion can be computed via the total flux and capillary pressure matching conditions at the interface between the inclusion and the matrix. When capillarity is included, the effect of entry capillary pressure on hydrodynamics of two-phase flow is investigated. The leakage through the semi-permeable layer occurs if and only if the current height exceeds a threshold value which can be determined through the matching condition of capillary pressure on both sides of the interface. The analytical model is then compared to numerical simulations performed with the code DuMu^x, an open-source simulator for flow and transport processes in porous media developed by the University Stuttgart (Flemisch et al., 2011). We show that the model provides a good prediction of CO₂ stratification beneath the inclusion.

3.2 Two-phase incompressible, immiscible flow model

The governing equations of two-phase incompressible, immiscible flow are given by Darcy's law and mass conservation equation :

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{kk_{r\alpha}}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha + \rho_\alpha g \mathbf{e}_z) , \quad \alpha = nw, w. \quad (3.1)$$

$$\phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_\alpha = S_\alpha , \quad \alpha = nw, w. \quad (3.2)$$

where ϕ [-] is the porosity of the medium, the subscripts w and nw denote the wetting (brine) and non-wetting (CO₂) phase. S_α [-], \mathbf{q}_α [L/T] and \mathcal{S}_α [L/T] are respectively the saturation, darcian velocity and sink/source terms of the phase α ; g [L/T²] is the gravity acceleration; k [L²] is the absolute permeability of medium in single phase flow which varies spatially within heterogeneous media; p_α [M/(LT²)], ρ_α [M/L³], μ_α [M/(LT)] and k_{r_α} [-] denote, respectively, the pressure, the density, the viscosity and relative permeability of phase α . The relative permeabilities are considered as functions of only the phase saturations and can be given by the simplified Brooks and Coorey's formulas :

$$k_{r_w} = S_{w_e}^2, \quad (3.3)$$

$$k_{r_{nw}} = (1 - S_{w_e})^2, \quad (3.4)$$

where S_{w_e} denotes the normalized wetting saturation, defined by :

$$S_{w_e} = \frac{S_w - S_{w_r}}{1 - S_{w_r} - S_{nw_r}}. \quad (3.5)$$

In equation (3.5), S_{α_r} denotes the residual saturation of phase α . For simplicity, all residual saturations are neglected. The saturations of wetting and non-wetting phase sum up to 1 : $S_w + S_{nw} = 1$. In what follows, the saturation of non-wetting phase S_{nw} is written for convenience as S . Thus, equations (3.3) and (3.4) become :

$$k_{r_w}(S) = (1 - S)^2, \quad (3.6)$$

$$k_{r_{nw}}(S) = S^2. \quad (3.7)$$

The difference of phase pressures defines the capillary pressure :

$$p_c = p_{nw} - p_w. \quad (3.8)$$

The capillary pressure is usually viewed as a function of wetting saturation and can be given by either a Van Genuchten (VG) (Van Genuchten, 1980) or a Brooks and Corey's (BC) (Brooks and Corey, 1964) function. The hysteresis in the capillary pressures curves is neglected. A same capillary pressure function is used for both the imbibition and drainage processes. In this paper, only BC capillary pressure expression is investigated :

$$p_c(S) = \sigma \sqrt{\frac{\phi}{k}} J(S), \quad (3.9)$$

where $J(S) = (1 - S)^{-1/\lambda}$ is the Leverett's function depending on the saturation of non-wetting phase and the pore size distribution parameter λ ; σ [Pa] is the interfacial tension between phases. The entry pressure corresponds to the capillary pressure value when $S = 0$:

$$p_e = p_c(S = 0) = \sigma \sqrt{\frac{\phi}{k}}. \quad (3.10)$$

Incorporating the equations (3.1) and (3.8), we recast the non-wetting phase darcian velocity :

$$\mathbf{q}_{nw} = \mathbf{q}_t f(S) + \frac{k}{\mu_w} \Lambda(S) (\Delta \rho g \mathbf{e}_z - \nabla p_c), \quad (3.11)$$

where \mathbf{q}_t is total velocity :

$$\mathbf{q}_t = \mathbf{q}_w + \mathbf{q}_{nw}, \quad (3.12)$$

$$f(S) = \frac{k_{r_{nw}}(S)}{k_{r_{nw}}(S) + Mk_{r_w}(S)}, \quad (3.13)$$

and

$$\Lambda(S) = \frac{k_{r_{nw}}(S)k_{r_w}(S)}{k_{r_{nw}}(S) + Mk_{r_w}(S)} \quad (3.14)$$

with $M = \mu_{nw}/\mu_w$, the viscosity ratio, and $\Delta\rho = \rho_w - \rho_{nw}$. In the equation (3.13), $f(S)$, so-called the fractional flux, is a monotonic increasing S -shaped function which is widely studied in the works of Hayek et al. (2009); Mikelic et al. (2002); Van Duijn et al. (2007) while $\Lambda(S)$ function has a bell-shaped form (Hayek et al., 2009; Andreianov and Cances, 2013). Substituting the equation (3.11) into the equation (3.2), we deduce :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ \mathbf{q}_t f(S) + \frac{k}{\mu_w} \Lambda(S) \Delta\rho g \mathbf{e}_z - \frac{k}{\mu_w} \Lambda(S) \nabla p_c \right\} = 0, \quad (3.15)$$

where the sum of the first two terms in the bracket of the equation (3.15), the viscous and the buoyant terms, is the convective flux

$$\mathcal{C}(S) = \mathbf{q}_t f(S) + \frac{k}{\mu_w} \Lambda(S) \Delta\rho g \mathbf{e}_z. \quad (3.16)$$

3.3 One-dimensional piecewise homogeneous porous medium

In order to study the CO₂ migration in a bidimensionnal heterogeneous media, we consider in a first step the one-dimensional dynamics of a CO₂ plume in a vertical column filled with a piecewise homogeneous porous medium. For sake of simplicity, only the absolute permeability is heterogeneous, k^+ for the high-permeability layer and k^- for the low-permeability layer. Other material parameters remain constant over the whole domain. The hydrodynamics of a two-phase mixture at the interface of such a discontinuous medium under simultaneous effects of capillarity and gravity forces has been rarely studied in the literature. We refer the readers to the works of Kaasschieter (1999); Langtangen et al. (1992); Adimurthi et al. (2004) who solve theoretically and/or numerically the Riemann problems associated to the Buckley–Leverett equation with gravity in absence of capillary pressure. Many authors studied the effect of capillarity on the two phase flow dynamics at the interface between two layers in the case where one phase is injected at the medium inlet, *i.e.* with a non-zero total velocity, by disregarding gravity effect (Mikelic et al., 2002; Buzzi et al., 2009). To authors knowledge, Clément Cancès is the only author who considers two-phase flow in one-dimensional discontinuous heterogeneous media under the effects of capillary and gravitational forces (Cances, 2008; Cancès et al., 2009; Cances, 2010a,b). The author and his coworkers proved the existence of a weak solution which satisfies the total flux continuity and capillary pressure matching condition at the interface between homogeneous porous sub-domains. However, the author did not study neither the temporal evolution of saturation at the interface when a buoyant plume arrives at the interface nor its dependence with respect to the physical parameters of the problem. Hereby, we restrict our attention to countercurrent flow, $\mathbf{q}_t=0$, which means that there is no phase injection in the column and sink/source

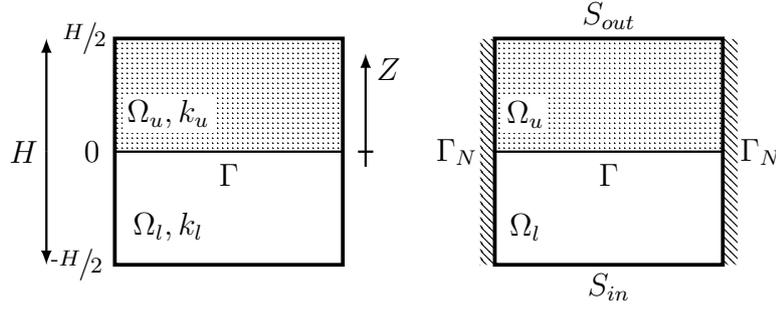


Figure 3.1 – Sketch of the piecewise homogeneous porous medium (left) and boundary conditions (right). The z -axis points upwards.

terms are absent. In other words, the two phases bypass each other under the effect of gravity : the non-wetting phase rises upward and the wetting phase downward.

3.3.1 Interface continuity conditions

In what follows, we discuss the hydrodynamics of a CO₂ plume in a vertical H [m] height column filled with two homogeneous sub-domains where the interface locates at $z = 0$ m (figure 3.1). The whole domain is initially saturated with water and a constant non-wetting phase saturation is imposed at the bottom of the column corresponding to a gravitational influx value. Here and at the sequel, the subscripts $[l, u]$ denote the quantities or functions in the lower and upper sub-interval respectively, while those with the subscripts $[L, U]$ are one-sided traces at the interface Γ of these quantities/functions.

We note k_i , G_i and Φ_i the absolute permeability, the gravitational flux and the total flux function of porous medium i , respectively ($i = [l, u]$). The same Brooks–Corey relative-permeability function is used for both media. A constant gas saturation is imposed at the bottom of the column. At the top of the column a saturation $S_{out} = 0$ is prescribed and CO₂ is free to flow out (figure 3.1). The governing equation of 1D model reads :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{k(z)}{\mu_w} \Lambda(S) \left(\Delta \rho g - \frac{\partial p_c}{\partial z} \right) \right\} = 0. \quad (3.17)$$

For convenience, let us recast the governing equations in dimensionless form. The definition of dimensionless numbers for two-phase flow at the macro-scale differs from one author to another one. The depth H of the medium is set as the characteristic length scale and the time T for CO₂ to migrate all along the column filled with the high permeability material only is set as the characteristic time of observation. The intrinsic permeability of this material k^+ is also chosen as the permeability scale of the medium. In the following equation, the characters with hat denotes the dimensionless variables :

$$\hat{z} = \frac{z}{H}, \quad \hat{k}(z) = \frac{k(z)}{k_0}, \quad \hat{t} = \frac{k_0 g (\rho_w - \rho_g)}{\phi H \mu_w} t. \quad (3.18)$$

Let us introduce the capillary pressure number N_c :

$$N_c = \frac{\sigma}{g(\rho_w - \rho_g)H} \sqrt{\frac{\phi}{k_0}} = \frac{p_e}{g(\rho_w - \rho_g)H}.$$

For simplicity, in what follows, the variables without hat denote the dimensionless variables of the problem. The dimensionless equation can be written as :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \left\{ k(z) \Lambda(S) \left(1 - \frac{N_c}{\sqrt{k(z)}} J'_s \frac{\partial S}{\partial z} \right) \right\} = 0. \quad (3.19)$$

When capillarity is neglected ($N_c = 0$), the flux term contains only the gravitational part and the equation (3.19) reduces to the well-known Buckley- Leverett equation with gravity :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial G(S)}{\partial \hat{z}} = 0, \quad (3.20)$$

where $G(S) = k(z) \Lambda(S)$ denotes the gravitational flux of the two-phase flow.

According to the permeabilities of the sub-domains, two cases must be considered. In the first case, the upper sub-domain is more permeable than the lower one, $(k_l, k_u) \equiv (k^-, k^+)$ and, in the second case, the lower sub-domain is more permeable than the upper one, $(k_l, k_u) \equiv (k^+, k^-)$. In both cases, the difference of entry capillary pressure induced by the permeability discontinuity leads to wetting and non-wetting phase saturations discontinuities at the interface. The one-sided traces of saturation (S_L and S_U) must fulfil two conditions : the continuity of total flux and the continuity of capillary pressure.

The total flux continuity condition is expressed as :

$$\Phi_l(S_L) = \Phi_u(S_U) \Leftrightarrow k_l \Lambda(S_L) \left(1 - \frac{N_c}{\sqrt{k_l}} J'_s \frac{\partial S_L}{\partial z} \right) = k_u \Lambda(S_U) \left(1 - \frac{N_c}{\sqrt{k_u}} J'_s \frac{\partial S_U}{\partial z} \right). \quad (3.21)$$

When capillary diffusion is neglected the continuity of the total flux reduces to :

$$G_l(S_L) = G_u(S_U) \Leftrightarrow k_l \Lambda(S_L) = k_u \Lambda(S_U). \quad (3.22)$$

The gravity flux curves are shown on figure 3.2.

In order to ensure a natural way to connect the capillary pressures at the interface between layers, we need to define the multi-valued capillary pressure function. This notion is widely used in the study of discontinuous-flux problems (Cances, 2008; Cancès et al., 2009; Buzzi et al., 2009). The extended capillary pressure function is written as :

$$\bar{p}_c(S) := \begin{cases} \sigma \sqrt{\frac{\phi}{k(z)}} J(S) & \text{if } 0 < S < 1, \\ (-\infty, p_{c,min}] & \text{if } S = 0, \\ [p_{c,max}, +\infty) & \text{if } S = 1. \end{cases} \quad (3.23)$$

where $p_{c,min} = \lim_{S \searrow 0} p_c$ and $p_{c,max} = \lim_{S \nearrow 1} p_c$.

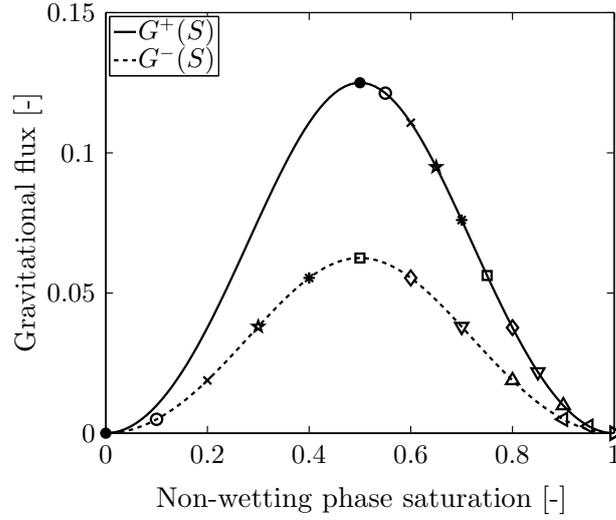


Figure 3.2 – Gravitational fluxes of the low permeability layer (dashed line) and high-permeability layer (continuous line). Each pair of markers on these curves represent a couple of saturations satisfying the capillary pressure continuity at the interface Γ , equation (3.24).

Thus, the continuity of capillary pressure reads :

$$\bar{p}_{c,l}(S_L) \cap \bar{p}_{c,u}(S_U) \neq \emptyset. \quad (3.24)$$

In the case where both S_L and S_U satisfy $0 < S_L < 1$ and $0 < S_U < 1$, the capillary pressure continuity condition (3.24) becomes :

$$p_{c,l}(S_L) = p_{c,u}(S_U). \quad (3.25)$$

The matching condition of capillary pressure when flow occurs from a high permeability to a low permeability introduces the notion of a threshold saturation S^* :

$$p_c^+(S^*) = p_c^-(0) \Leftrightarrow \frac{J(S^*)}{\sqrt{k^+}} = \frac{J(0)}{\sqrt{k^-}}. \quad (3.26)$$

Figure 3.3 shows the capillary pressure functions in the sub-domains as well as the link of saturation traces at the interface. Figure 3.3a and figure 3.3b describe the case $k_l = k^-$, $k_u = k^+$ while figure 3.3c and figure 3.3d correspond to the case $k_l = k^+$, $k_u = k^-$. The capillary pressure constraint on S_L and S_U must be solved with the flux continuity equation (3.21) at the interface, or equation (3.22) if capillary diffusion vanishes.

One can note the capillary pressure discontinuity in two cases : (i) $p_{c,l}(S_L) > p_{c,u}(S_U)$ in figure 3.3a when $S_L = 0, S_U < S^*$, and (ii) $p_{c,l}(S_L) < p_{c,u}(S_U)$ in figure 3.3c when $S_U = 0, S_L < S^*$. In these cases, the extended capillary pressure equation (3.24) must be used to connect naturally the capillary pressure at the interface. In other cases, figures 3.3b and 3.3d, the one-sided traces of saturation S_L and S_U can be linked each other via the capillary pressure matching condition in the equation (3.25).

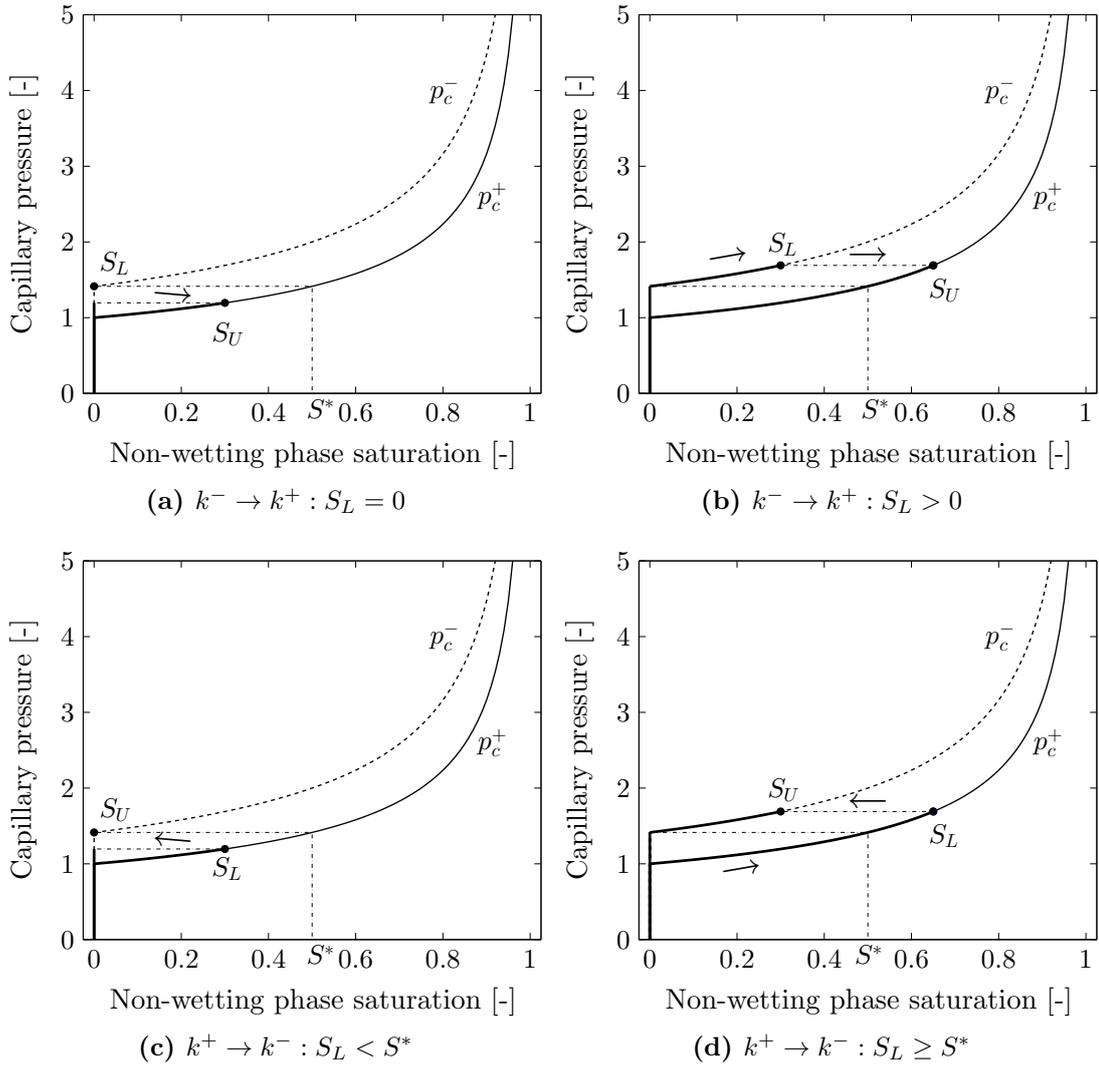


Figure 3.3 – Matching condition of capillary pressure at the interface between two sub-domains. The capillary pressure function of the permeable layer is depicted by the red discontinuous line while the blue continuous one represents the capillary pressure curve in the permeable layer. The connected parts of capillary pressure curves are depicted by bold continuous lines.

Let us consider now the temporal dynamic behaviour of the CO_2 at the interface. Note that the dynamics of the two phase flow CO_2 -brine depends strongly on the capillary number value, N_c . According to this number, the problem may be classified into four regimes of CO_2 migration : capillarity-dominant flow ($N_c \gg 1$), balance case ($N_c \approx 1$), gravity-dominant flow ($N_c \ll 1$) and capillary-free flow ($N_c = 0$). When $N_c \geq 1$, due to the capillary diffusion, the CO_2 saturation profile in each layer is pseudo linear. This case is not considered here and is discussed in another work. The capillary-free case has been discussed in Mouche et al. (2010). In this paper, we consider only the gravity-dominant flow with a low capillary number, $N_c \ll 1$. Our purpose is to investigate the local stratification of CO_2 caused by gravity effect and capillary constraint beneath the interface. In the following paragraphs, § 3.3.2 and § 3.3.3, we will present a case-by-case

study of the CO₂ migration through the interface between the two sub-domains. When the capillary number tends to 0, we obtain the *vanishing capillary limits solution* of the interface problem (see Andreianov and Cances, 2013, for further details). All simulations in this section are performed with a home-made finite difference code based on Godunov discretization scheme and the algorithm of Cances (2008) for the matching conditions at the interface. In all cases, the permeability contrast is $k_l/k_u = 1/2$ resulting in the entry capillary pressure ratio $p_{e,l}/p_{e,u} = \sqrt{2}$.

3.3.2 Flow from k^- to k^+

When the CO₂ front reaches the interface Γ , no capillary pressure barrier exists since the entry capillary pressure of the upper sub-domain is greater than that of the lower one. Hence, CO₂ can penetrate into the upper sub-domain. The upper saturation trace S_U is governed by the total flux continuity condition as graphically represented in figure 3.4a. Depending on the S_U value, two cases must be considered :

- $S_U \leq S^*$ (as in figure 3.3a) : S_L does not increase over time and remains equal to zero. The capillary pressure condition is therefore automatically satisfied thanks to the extended capillary pressure definition.
- $S_U > S^*$ (as in figure 3.3b) : The one-sided saturation trace beneath Γ increases from 0 to a S_L value which respects the capillary pressure continuity : $p_{c,l}(S_U) = p_{c,l}(S_L)$.

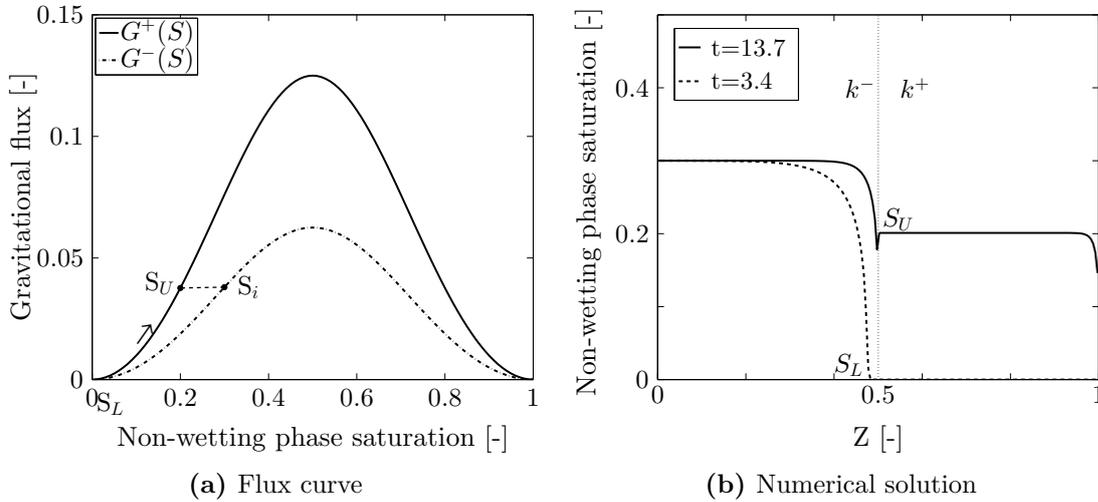


Figure 3.4 – CO₂ migration in a vertical column filled with a piecewise homogeneous porous medium : Case (1) upper sub-domain is more permeable than lower sub-domain.

Figure 3.4b reports the temporal evolution of CO₂ saturation for the case where the imposed saturation at the inlet is set to $S_i = 0.3$. From the gravitational flux curve in figure 3.4a, the upper saturation trace is $S_U \approx 0.2$. In principle, the lower saturation trace should be 0. However, in a finite difference scheme, variables are assigned at cell centers but not cell edges. Accordingly, the one-sided traces of saturation cannot be re-

presented in figure 3.4b.

3.3.3 Flow from k^+ to k^-

The capillary pressure continuity is no longer automatically satisfied as in the first case. Therefore, the accumulation of CO_2 beneath the interface takes place. The capillary constraint leads to the notion of a threshold saturation S^* corresponding to the entry capillary pressure of low-permeability layer as in the equation (3.26). Note that in both sub-domains, $p_c(S)$ is always a strictly increasing function. Therefore, when S_L is less than a threshold saturation S^* , $p_{c,l}(S_L)$ is less than $p_{c,u}(0)$ (figure 3.3b). The CO_2 cannot penetrate into the upper sub-domain. Thanks to the extended capillary pressure in the equation (3.23), we get a pseudo-continuity of capillary pressure in this situation. The accumulation of the non-wetting phase below the interface occurs until S_L is equal to S^* . Beyond this value, the CO_2 gets through the interface and the saturations S_L and S_U satisfy the equation (3.24) as shown in figure 3.3c.

To graphically illustrate the solution of the couple of continuity conditions, let us define the set :

$$\mathcal{P} := \left\{ (S_L, S_U) \in [0, 1]^2 \mid \bar{p}_{c,l}(S_L) \cap \bar{p}_{c,u}(S_U) \neq \emptyset \right\}. \quad (3.27)$$

Since p_c is strictly increasing in $(0,1)$ and the extended capillary pressures include the saturation interval endpoints ($S = 0$ and $S = 1$), the curve \mathcal{P} is a monotone graph from $[S^*, 1]$ to $[0, 1]$ (see Andreianov and Cances (2013)). The curve \mathcal{G} is given by :

$$\mathcal{G} := \left\{ (S_L, S_U) \in [0, 1]^2 \mid G_l(S_L) = G_u(S_U), G'_u(S_U) \geq 0 \right\}. \quad (3.28)$$

Due to the bell-shaped form of buoyancy flux, one must define three different sets of \mathcal{G} depending on the position of saturation traces in the gravitational flux curve (figure 3.5) :

$$\mathcal{G}_1 := \left\{ (S_L, S_U) \in [0, 1]^2 \mid G_l(S_L) = G_u(S_U), G'_l(S_L) \leq 0, G'_u(S_U) \geq 0 \right\}, \quad (3.29)$$

$$\mathcal{G}_2 := \left\{ (S_L, S_U) \in [0, 1]^2 \mid G_l(S_L) = G_u(S_U), G'_l(S_L) \leq 0, G'_u(S_U) \geq 0 \right\}, \quad (3.30)$$

and the last segment which illustrates the optimal entropy solution at the interface :

$$\mathcal{G}_3 := \left\{ (S_{opt,L}, S_{opt,U}) \in [0, 1]^2 \mid G_l(S_{opt,L}) = G_u(S_{opt,U}), G'_u(S_{opt,U}) = 0 \right\}. \quad (3.31)$$

Figure 3.5 illustrates graphically the capillary and gravity graphs \mathcal{P} and \mathcal{G} . The intersection between these graphs defines the solution \bar{S}_{LU} of the local interface problem at the steady state. We observe that the intersection point is localized on the segment \mathcal{G}_2 of the gravity graph \mathcal{G} .

The hydrodynamics at the interface depends also on the imposed saturation value at the domain inlet and the associated gravitational influx. According to the imposed saturation value, we classify the problem into two sub-cases : $S_i \leq S_1$ and $S_i > S_1$. Let us consider the interface problem by a case-by-case approach with these two boundary

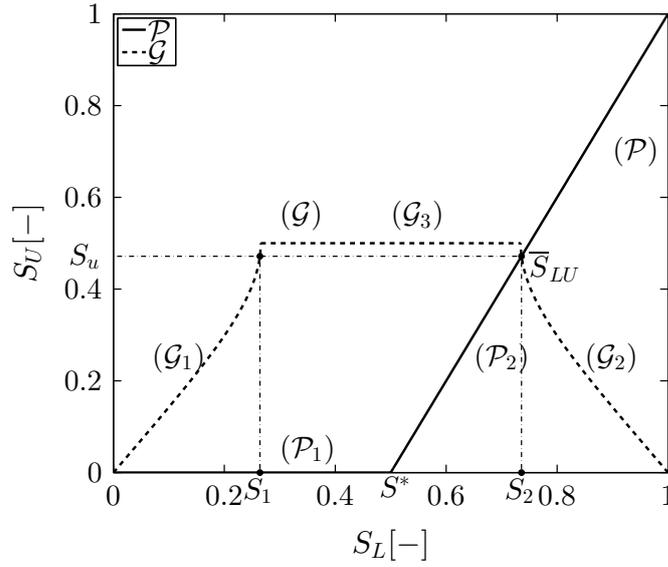


Figure 3.5 – The monotone graph \mathcal{P} (continuous line) is defined by the equation (3.27) from the extended capillary pressure functions $\bar{p}_{c_{l,u}}$. The curve \mathcal{P} contains two segments : \mathcal{P}_1 for $S_L \leq S^*$ and \mathcal{P}_2 for $S_L \geq S^*$. The graph \mathcal{G} (dashed line) is defined by equation 22 from the convective flux functions $G_{l,u}$. The curve \mathcal{P} consists of three segments : \mathcal{G}_1 (from the equation (3.29)), \mathcal{G}_2 (from the equation (3.29)) and the horizontal segment \mathcal{G}_3 in the case $G_l(S_L) \geq \max \{G_u(S_U), S_U \in [0, 1]\}$. The intersection point defines the solution of the problem at the steady state, when $k^-/k^+ = 1/2 \rightarrow \mathcal{P} \cap \mathcal{G}_2 \equiv \bar{S}_{LU} = (S_2, S_u)$. The solution of Buckley-Leverett problem is indeed the *optimal entropy solutions* $S_{opt,U}$ where $G'_u(S_{opt,U}) = 0$ (Adimurthi et al., 2004; Andreianov and Cances, 2013).

conditions.

Case 2a : $S_i \leq S_1$

A fairly low saturation, $S_i = 0.15$, is imposed at the bottom of the column. When the CO₂ plume reaches the interface, the capillary barrier results in an increase of CO₂ saturation at the interface up to the critical value S^* first, then to a greater value ruled by the two continuity conditions, which are expressed by the equations (3.21) and (3.24) as can be observed on Figure 3.7b. One observe that at $t=3.4$, the CO₂ has reached the interface beneath which the CO₂ begins to accumulate. The saturation at the interface grows until S^* to overcome the capillary barrier and then increases a little bit more to satisfy the flux continuity condition. The upper one-sided saturation S_U is derived from the flux continuity condition : For all imposed saturation $S_i \leq S_1$, there exists always a saturation S_U on the other side of the interface which satisfies $G_u(S_U) = G_l(S_i)$ (figures 3.6). The imposed saturation value $S_i = 0.15$ set the upper one-sided saturation trace $S_U = 0.22$ which is also recovered on the CO₂ saturation profile in figure 3.7b (see also figure 3.6 and figures 3.7a for the connection behaviour). The saturation S_L is determined from the continuity of capillary pressure at the interface Γ via the equation (3.24), then $S_L = 0.61$. The difference between the buoyant fluxes $G_u(S_U)$ and $G_l(S_L)$ is compensated by a diffusion term which is expressed by a positive gradient on the CO₂ saturation

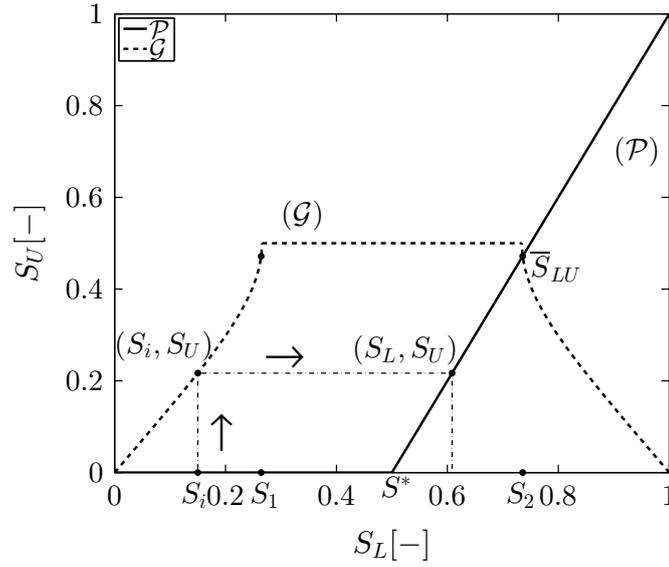


Figure 3.6 – Principle to find the couple of connection points at the interface following the red arrow in the case (2a)

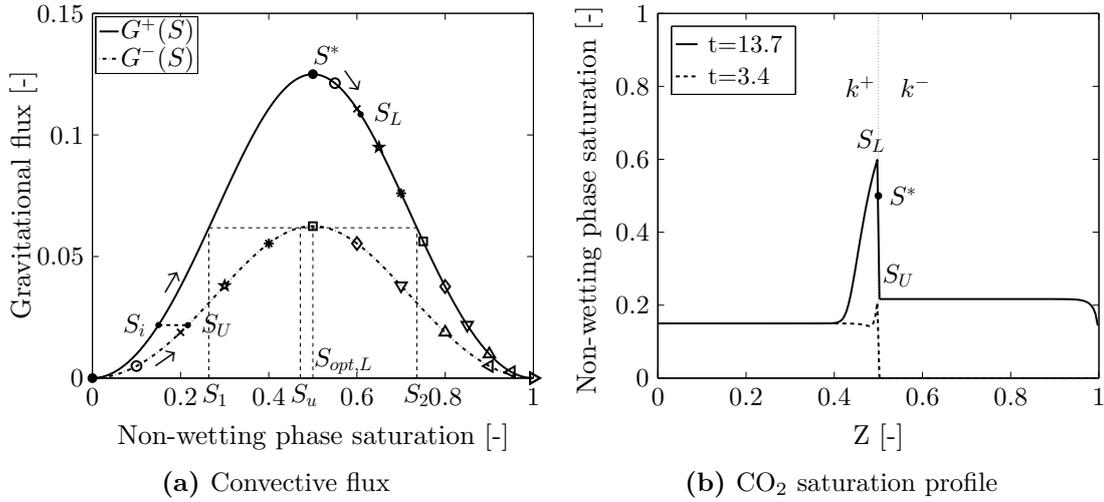


Figure 3.7 – CO₂ migration in a vertical column filled with a piecewise homogeneous porous medium : Case (2a) lower sub-domain is more permeable than upper sub-domain with a low inflow

profile beneath the interface Γ (figure 3.7b). Note that even if N_c varies, the one-sided saturation traces (S_L, S_U) , and therefore the gravitational flux difference $G_l(S_L) - G_u(S_U)$ remain unchanged. In the limit $N_c \rightarrow 0$, the saturation gradient increases significantly. As a result, the accumulation beneath Γ shrinks dramatically and disappears when capillary diffusion is neglected.

Case 2b : $S_i > S_1$

A relatively high saturation, $S_i = 0.3$, is imposed at the bottom of the column. The accumulation process at the interface occurs until S_L reaches the critical value S^* . Once the capillary barrier has been overcome, the gas saturations on both sides of Γ increase simultaneously ($S_L : S^* \rightarrow 1$ and $S_U : 0 \rightarrow 1$) in compliance with the capillary pressure continuity condition (path shown by the blue arrows in figure 3.8a). The system reaches the steady state when the flux continuity condition is satisfied. The steady state one-sided saturations (S_L, S_U) are indeed the coordinates of the intersection point \bar{S}_{LU} in figure 3.5 at which both the gravity and capillarity constraints at the interface are satisfied. The one-sided trace values (S_2, S_u) \equiv (0.73, 0.46) in figure 3.5 can be found in CO₂ saturation profile in figure 3.8b. The gravitational flux corresponding to \bar{S}_{LU} gives the maximal flux value of the low-permeability layer $\Phi^{lim} = G_l(S_2) = G_u(S_u)$. The difference between $G_l(S_i)$ and Φ^{lim} is compensated by a diffusion term which is either positive if $S_i < S_{l2}^p$ or negative otherwise.

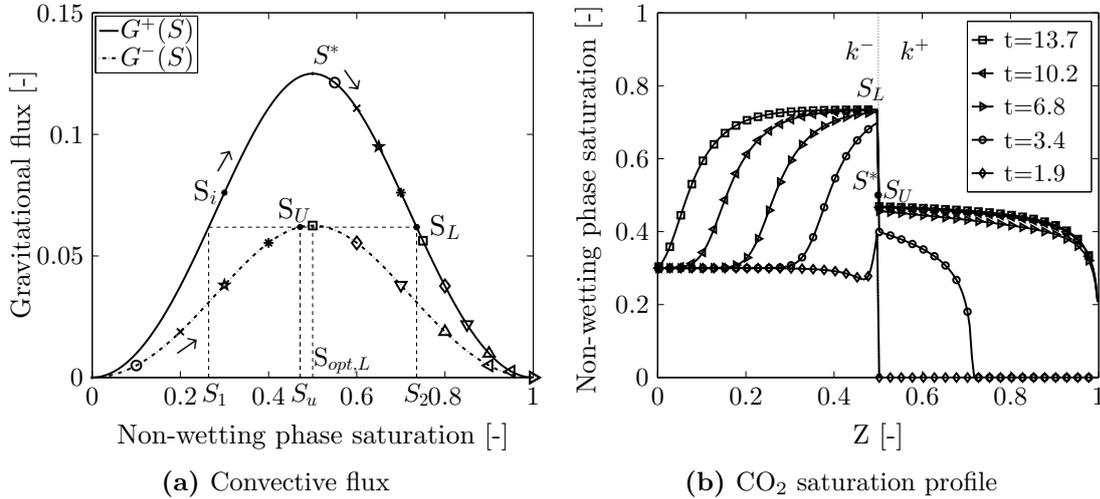


Figure 3.8 – CO₂ migration in a vertical column filled with a piecewise homogeneous porous medium : Case (2b) the lower sub-domain is more permeable than the upper sub-domain with a high imposed saturation

3.4 Single horizontal layer of finite extent

While the previous section is devoted to the interface problem in a one-dimensional geometry, we discuss in this section the hydrodynamics of the two-phase flow in a system consisting of a single embedded low permeability inclusion of finite length $2L$. The system is a rectangular box of $2L_0$ [m] width by H_0 [m] height. The inclusion is localized at the center of the box and leaves two gaps of width l [m] on each side (figure 3.9a). This system may be seen as an elementary cell of a periodic array of horizontal inclusions of length L separated by a distance $2l$. The permeabilities are k^m for the surrounding matrix and k^i for the inclusion. In addition, the inclusion is supposed to be semi-permeable, i.e. $k^i \neq 0$

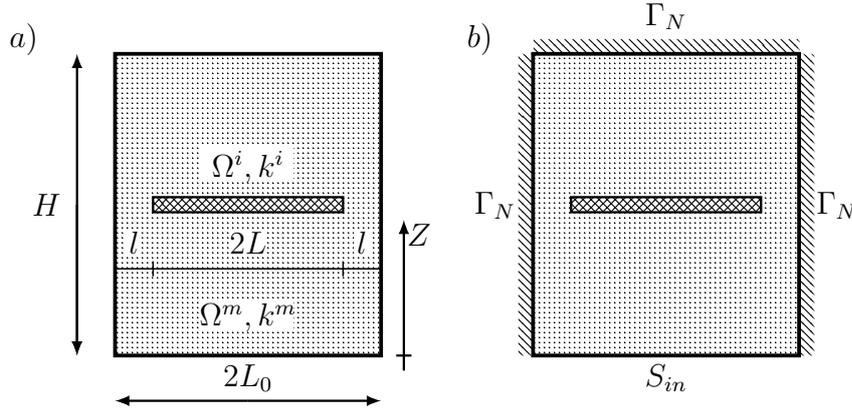


Figure 3.9 – Sketch of a single inclusion medium which consists of the low permeability layer Ω^i of permeability k^i surrounded by the background matrix Ω^m of permeability k^m (a) and prescribed boundary conditions of the problem (b)

but $k^i/k^m \ll 1$. A gas saturation S_i is imposed throughout the lower boundary of the domain which is initially saturated with brine. All other boundaries are impermeable (figure 3.9b). Such a setting of boundary condition results in a uniformly distributed influx δq at the bottom giving a total flux $q = 2L\delta q$. The brine is allowed to come out of the domain through the lower boundary. The CO_2 rises upwards mostly under buoyancy effect. The embedded low permeability inclusion is a barrier on the path of CO_2 migration which, according to the physical parameters of the problem may allow, or not, to let the gas penetrate and slow down its vertical velocity. If the inclusion is impermeable the CO_2 spreads horizontally and rises upwards through the edges of barrier. In order to evaluate the influence of capillary pressure on the migration process, two different cases are studied. In the first case, we consider the capillary-free case where capillary pressure is neglected, *i.e.* $N_c = 0$. In the second case, the capillary effect is investigated in the regime where the buoyancy force is dominant, *i.e.* $N_c < 1$. We show in § 3.4.3 that even though the absolute permeability of the inclusion is non-zero, in some cases, depending on the capillary number N_c and the ratio between the permeabilities k^i/k^m , the CO_2 may not penetrate into the inclusion due to the capillary barrier.

3.4.1 Gravity current model

Let us consider buoyancy-dominant flow of CO_2 along a horizontal impermeable layer. The predominantly horizontal flow in such problems, so-called *gravity current*, is induced by the density contrast between the CO_2 and the surrounding brine. Numerous studies of gravity currents in porous media use a sharp-interface approximation which assumes that the regions within and without the current are fully saturated and there exists a macroscopic sharp interface between two fluids (Huppert and Woods, 1995; Hesse and Woods, 2010; Gasda et al., 2009). These *single-phase gravity current* models can only be applied when the capillary pressure is negligible compared to gravity and viscous force and when the caprock beneath which the current spreads is impervious. When both phases are present, capillary diffusion, on the one hand, reduces the gas saturation within the gravity current and increases the vertical extent of the current on the other hand (see Figure 3.10, for example). Only Golding et al. (2011) takes into account the



Figure 3.10 – Gravity current underlying a impermeable boundary. The graduated color within the current indicates the variation of saturation due to capillary diffusion. We refer the reader to the online version of the article for colors.

capillary effect on the saturation distribution within current and proposes a vertically integrated model for a two-phase gravity current along an infinite horizontal impermeable barrier, in which local capillary effect is encapsulated directly into the total flux function. Hereby, we aim to extend the model of Golding et al. (2011) to study the two-phase gravity current along a permeable barrier of finite extent. For this purpose, we follow the modeling approach of this author. The two-phase gravity current model describing a current beneath a permeable boundary is based on the assumption of a vertical gravity-capillary equilibrium. This equilibrium expresses the balance between gravitational and capillary force within the current (Golding et al., 2011) :

$$\frac{\partial p_c}{\partial z'} = -\Delta\rho g. \quad (3.32)$$

The relationship between capillary pressure and current height can be deduced by integrating the equation (3.32) from z to gravity current height h :

$$p_c[h(x, t), z'] = p_e(1 - S_h)^{-1/\lambda} - \Delta\rho g(z' - h), \quad (3.33)$$

where S_h denotes the non-wetting phase saturation at $z' = h$ which commonly is equal to zero except when the gravity current is fed by a distributed source at the bottom of the column. The expression of CO₂ saturation within the current as a function of current height h and z' is given by :

$$S[h(x, t), z'] = 1 - \left((1 - S_h)^{-1/\lambda} + \frac{h - z'}{h_e} \right)^{-\lambda}, \quad (3.34)$$

with the height scale $h_e = p_e^m / \Delta\rho g$ where p_e^m is the entry capillary pressure of the matrix. The non-wetting phase saturation S_0 at $z' = 0$ is given as :

$$S_0 \equiv S_0(h/h_e) \equiv S[h(x, t), z' = 0] = 1 - \left((1 - S_h)^{-1/\lambda} + \frac{h}{h_e} \right)^{-\lambda}. \quad (3.35)$$

Vertical integration of the mass conservation equation (3.2) for the non-wetting phase over the gravity current yields :

$$\phi[S_0 - S_h] \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{k\Delta\rho g}{\mu_{nw}} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \mathcal{F}(h/h_e) \right] = \Phi_{in} - \Phi_{out}, \quad (3.36)$$

where Φ_{in} , Φ_{out} are respectively the vertical influx at $z' = h$ and vertical leakage term through the permeable boundary at $z' = 0$. These source terms do not appear in the model proposed by Golding and in which both the influx and the leakage term vanishes since the barrier is completely impermeable. The capillary effect on the gravity current is taken into account via the flux function $\mathcal{F}(h/h_e)$:

$$\mathcal{F}(h/h_e) \equiv \frac{\mu_{nw}}{h} \int_0^h \frac{k_{r_{nw}}(S(z))}{\mu_{nw}} dz = \frac{h_e}{\lambda h} \int_{S_h}^{S_0} S^2 (1-S)^{-(\lambda+1)/\lambda} dS. \quad (3.37)$$

An analytical expression of \mathcal{F} can be derived from Golding et al. (2011) :

$$\mathcal{F}(h/h_e) = \frac{h_e}{h} \left\{ \frac{(1-S_0)^{-1/\lambda}}{1-2\lambda} \left[S_0^2 + \frac{2\lambda(S_0-\lambda)}{\lambda-1} \right] - \frac{(1-S_h)^{-1/\lambda}}{1-2\lambda} \left[S_h^2 + \frac{2\lambda(S_h-\lambda)}{\lambda-1} \right] \right\}. \quad (3.38)$$

When the inclusion is impervious and the capillarity neglected, the gravity current is saturated with CO₂. When capillarity is taken into account, the current is a mixture of CO₂ and brine. Furthermore, when the inclusion is semi-permeable and capillarity is neglected CO₂ leaks into the inclusion and inversely brine leaks from the inclusion into the current. In this case the current is also a mixture of CO₂ and brine. The saturation S_{gc} within the current is supposed to be constant and can be determined from the continuity condition of gravitational flux as discussed further. We recover the equation describing the propagation of current given by Huppert and Woods (1995) with a slight difference in the flux term :

$$\phi [1 - S_h] \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{k\Delta\rho g}{\mu_{nw}} \frac{\partial}{\partial x} \left[k_{r_{nw}}(S_{gc}) h \frac{\partial h}{\partial x} \right] = \Phi_{in} - \Phi_{out}. \quad (3.39)$$

The profile of gravity current at steady state is deduced from the equations (3.36) and (3.39) as followed :

$$\frac{k k_{r_{nw}}(S_{gc}) \Delta\rho g}{\mu_{nw}} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \right] = -\Phi_{in} + \Phi_{out}, \quad (3.40)$$

for single-phase current, and

$$\frac{k\Delta\rho g}{\mu_{nw}} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \mathcal{F}(h/h_e) \right] = -\Phi_{in} + \Phi_{out}, \quad (3.41)$$

for two-phase current.

In general, the outflow flux Φ_{out} at the interface is considered as a drainage term which expression is based on hydrostatic pressure assumption (Acton et al., 2001; Spannuth et al., 2009; Neufeld and Huppert, 2009). Nevertheless, following the preceding section § 3.3.1, we will show further that the outflux can be estimated differently, *i.e.* from the continuity condition of total flux at the interface and with or without capillarity. In what follows, we discuss the validity of the model presented in this section to study post-injection migration of CO₂ in a single inclusion system. The petrophysical parameters of the medium and the fluids are summarized in Table 3.1. The domain is a 2D vertical column of 80 [m] width and 100 [m] height while the inclusion is 72 [m] width and

		Case 3	Case 4
Permeability of matrix k^m	[m ²]	$3. \times 10^{-12}$	$3. \times 10^{-12}$
Permeability of inclusion k^i	[m ²]	$3. \times 10^{-13}$	$3. \times 10^{-13} / 7.5 \times 10^{-13}$
Entry capillary pressure of matrix P_e^m	[Pa]	0	51 012
Entry capillary pressure of inclusion P_e^i	[Pa]	0	161 314 / 102 024
Porosity ϕ	[-]	0.35	0.35
Density of brine ρ_w	[kg/m ³]	1000	1000
Density of CO ₂ ρ_{nw}	[kg/m ³]	480	480
Viscosity of brine μ_w	[Pa.s]	$8. \times 10^{-4}$	$8. \times 10^{-4}$
Viscosity of CO ₂ μ_{nw}	[Pa.s]	$8. \times 10^{-4}$	$8. \times 10^{-4}$
Pore size distribution parameter λ	[-]	2.0	2.0
Residual saturation of brine S_{wr}	[-]	0.0	0.0
Residual saturation of CO ₂ S_{nwr}	[-]	0.0	0.0

Tableau 3.1 – Parameters for the simulations of capillary-free (case 3) and buoyancy-dominant (case 4) post-injection CO₂ migration in a single-inclusion medium

2 [m] thick. The validation is performed by intercomparing the model and numerical simulations performed with DuMu^x, an open-source simulator for flow and transport processes in porous media developed by the University Stuttgart (Flemisch et al., 2011). The capillary-free and the gravity-dominant cases are successively examined.

3.4.2 Capillary-free case

First of all, let us consider the single-phase gravity current in the capillary-free case (capillarity neglected). The CO₂ migrates under solely buoyancy effect. Such a problem with impermeable inclusions is widely studied in the literature, using the single-phase gravity current approach to estimate the amount of CO₂ immobilized due to residual trapping beneath the impermeable horizontal barrier (Green and Ennis-King, 2013; Hesse and Woods, 2010). For a gravity current over a permeable layer, we refer to the work of Ac-ton et al. (2001); Pritchard et al. (2001) who studied propagation of a two-dimensional gravity current through a thin and low permeability layer using a simple drainage model. In this model the vertical volume flux through the low permeability layer is proportional to the height of the current. However, the outflux can be derived from the continuity condition of the total flux at the interface Γ via the equation (3.22). Note that unlike the 1D case, although the averaged total velocity over 2D domain is equal to 0, the fluctuation of the total velocity \mathbf{q}_t exists locally and may contribute to the convective flux via the equation (3.11). Nevertheless, an analytical derivation of the local total velocity fluctuation is not straightforward, if not impossible. Thus in a first step, the velocity contribution to the convective flux function is disregarded. Only gravity effect is taken into account. When the CO₂ has reached the interface matrix-inclusion, the dynamics of the two-phase flow is governed only by the continuity of the gravitational flux (Hayek et al., 2009; Mouche et al., 2010) through the equation (3.22). In a second step, we show how the total velocity may play a role in the total flux at the interface and may influence

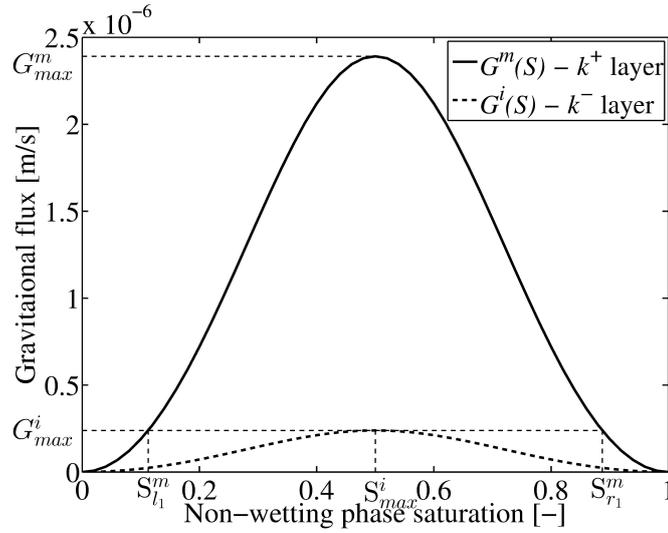


Figure 3.11 – Gravitational flux functions of inclusion and matrix in the case $k^i/k^m = 1/10$. G_{max}^i and G_{max}^m are respectively the maximal gravitational flux in the inclusion and the matrix. S_{max}^i is the saturation in the inclusion so that $G^i(S_{max}^i) = G_{max}^i$. The saturations $S_{l_1}^m$ and $S_{r_1}^m$ satisfy $G^m(S_{l_1}^m) = G^m(S_{r_1}^m) = G_{max}^i$.

on the gravity current beneath the semi-permeable layer.

In the absence of capillary constraint, the accumulation beneath the low-permeability inclusion is characterized by a saturation discontinuity at the matrix-inclusion interface with a higher saturation $S^i(z_0, t)$ on the inclusion side and a lower one $S^m(z_0, t)$ on the matrix side, where z_0 is the interface coordinate. This results directly from the fact that the inflow flux is greater than the maximal flux in the inclusion. Therefore, in order to satisfy the flux continuity condition at the interface (Hayek et al., 2009) the flux passing through the interface reduces to a value $\mathcal{C}^m(S^i(z_0, t))$ equal to the maximal flux value in the inclusion. The difference between the inflow flux and $\mathcal{C}^m(S^i(z_0, t))$ is converted into a backflow downward, on one hand and on the other in a horizontal spreading along the inclusion that allows CO_2 to rise upwards at the inclusion edges. If the inflow flux is smaller than $\mathcal{C}^m(S^i(z_0, t))$ there is no backflow and no gravity current, all the CO_2 flux penetrates into the inclusion.

3.4.2.1 Maximum inflow flux

When the velocity term is negligible, the convective flux $\mathcal{C}(S)$ contains solely the gravitational flux $G(S)$. Figure 3.11 shows the buoyant flux functions of the inclusion and the matrix for the case $k^i/k^m = 1/10$. Note that the inclusion creates a filter that transmits only a limited fraction of the inflow flux. The corresponding maximal buoyant flux, or threshold flux, is the sum of the total buoyant flux passing through the gaps and the inclusion :

$$F_{thres} = 2lG_{max}^m + 2LG_{max}^i, \quad (3.42)$$

where G_{max}^i is the maximal value of the gravitational flux in the inclusion. It is straightforward to find that $S_{l_1}^m$, defined by the relationship $G^m(S_{l_1}^m) = G_{max}^i$, is lower than the threshold saturation S_{thres} which is related to the threshold flux value F_{thres} .

$$F_{thres} = (2l + 2L)G^m(S_{thres}). \quad (3.43)$$

With the parameter provided in Table 3.1, the threshold imposed saturation is $S_{thres} = 0.1568$. Based on the continuity condition of the total flux, we note that three cases **C.(1,2,3)** must be identified :

- **C.1** : $S_i \leq S_{l_1}^m$: No accumulation appears. All the inflow of CO₂ pass through the inclusion.
- **C.2** : $S_{l_1}^m \leq S_i \leq S_{thres}$: CO₂ accumulates and spreads beneath the inclusion and then rises upwards at the edges of the inclusion. After a very long time, the CO₂ accumulation beneath the inclusion reaches steady state.
- **C.3** : $S_{thres} \leq S_i$: The high inflow flux leads to a ceaseless CO₂ backflow downward beneath the inclusion indicating that quasi-steady state cannot be reached.

Note that the VE assumption used by the gravity current approach remains valid in the limit where the height of gravity current is much lower than its horizontal extent $H_{gc}/L_{gc} \ll 1$. Hence, the model presented above is applicable only to describe the CO₂ stratification under the inclusion for moderate imposed saturations, i.e. for the case **(C.2)** which ensure the existence of gravity current at steady state. The influx can be divided into two separated terms : (i) $G^i(S_{max}^i)$ which provokes a smooth flow with no accumulation under the inclusion ; and (ii) the difference $\bar{\Phi}_{io} = G^m(S_i) - G^i(S_{max}^i)$ which causes the gravity current. These two independent flux terms result in two different flow regimes, the smooth flow and gravity current spreading, and the interaction between them is disregarded. The height of gravity current is derived from the equation (3.53) in 3.6. The saturation within the current S_{gc} is supposed to be constant and equal to the saturation $S_{r_1}^m$ (figure 3.11). The saturation in the zone outside the gravity current of the matrix, $S_{l_1}^m$, can also be determined from the continuity condition of the buoyant flux as graphically shown on Figure 3.11. In our case, the values of $S_{l_1}^m$ and $S_{r_1}^m$ are equal to 0.1125 and 0.8875 respectively.

Figure 3.12 reports the effect of the imposed saturation on the two-phase flow dynamics. For the low inflow case **C.1**, e.g. $S_i = 0.10$, no CO₂ accumulation beneath the inclusion appears. For the moderate inflow case **C.2**, e.g. $S_i = 0.15$, the gravity current beneath the inclusion reaches a steady state, the accumulation of process does not evolve at $t = t_2$ and $t = t_3$ (see Figures 3.12a, 3.12b, 3.12c). For a saturation higher than the threshold saturation S_{thres} (**C.3**), e.g. $S_i = 0.20$, the CO₂ accumulation underneath the impermeable inclusion increases ceaselessly (figures 3.12d, 3.12e, 3.12f).

In order to consider the CO₂ distribution within the inclusion and the dynamics at the upper inclusion-matrix interface, we reconstruct the whole CO₂ saturation field at steady state for the case $S_i = 0.15$. In addition, the effect of the top domain boundary condition is disregarded. Hence, we consider only the lower part of domain from $z = 0$

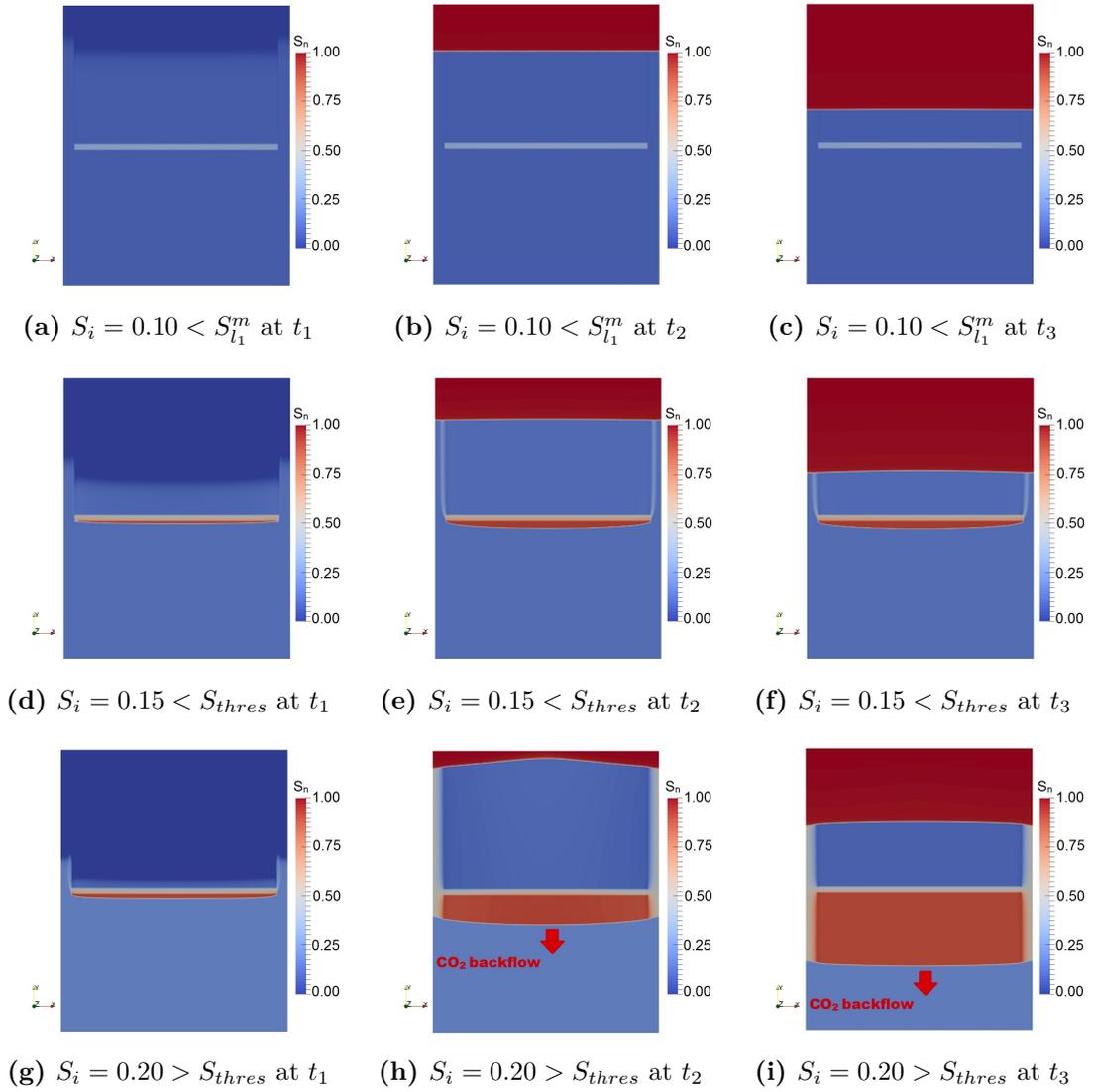


Figure 3.12 – Case 3 - Capillary-free case : CO₂ distribution after an early time t_1 (a,d,g) when the CO₂ has just reached the impermeable barrier, an intermediate time t_2 (b,e,h,k) and a relatively long time t_3 (c,f,i).

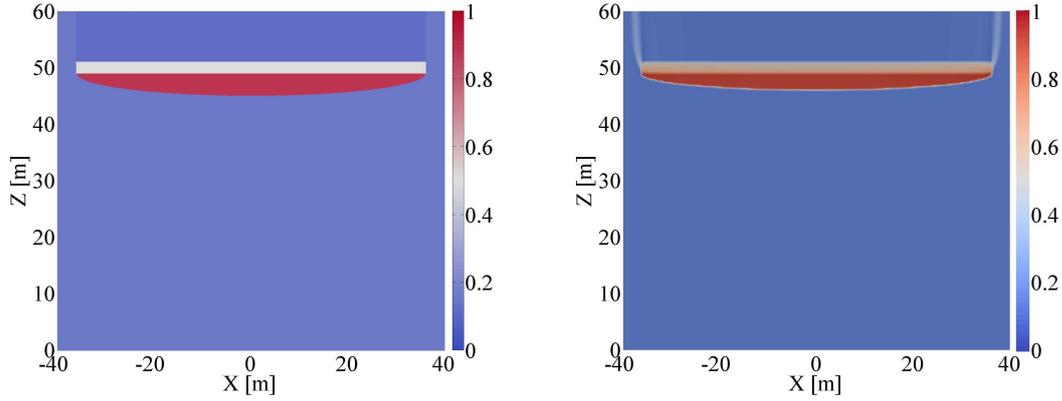


Figure 3.13 – Case 3 - Capillary-free case : CO₂ distribution from $z = 0$ [m] to the observation surface $z = 60$ [m] reconstructed using gravity current method (left) and simulated with DuMu^x (right). A moderate influx associated with $S_i = 0.15$ is imposed at the medium inlet.

[m] to the observation interface $z = 60$ [m]. A comparison between CO₂ saturation distribution predicted by the gravity current model and the simulated distribution is depicted in figure 3.13. It shows a fairly good agreement between the numerical and analytical results, both for the saturation in the matrix and in the inclusion but also for the shape of the CO₂ current beneath the low permeability barrier. One can note that the gravity current method slightly overestimates the height of CO₂ accumulation plume. It is possibly related to the fact that the model underestimates the leakage flux through the inclusion, and therefore the term $\Phi_{in} - \Phi_{out}$ in the equation (3.54). Local total velocity fluctuation may modify the total flux function. Consequently, taking into account local velocity fluctuation may change not only the saturation within the current and the inclusion, as well as on the inclusion side of the interface inclusion-matrix, but also all the maxima of the flux functions.

3.4.2.2 Impact of total velocity fluctuations

In order to illustrate the influence of local total velocity fluctuation, let us consider the CO₂ saturation along the central axis for the case $S_i = 0.15$. When considering the flux continuity at the interface matrix-inclusion, the total velocity fluctuation \mathbf{q}_t is taken into account. As the inclusion thickness is very small with respect to the column height, the pressure gradient $\partial p/\partial z$ and the saturation S_{maxp}^i within the inclusion along the vertical axis can be supposed to be constant. Along the central Z-axis for $x = 0$, in the absence of an analytical formula, \mathbf{q}_t is calculated approximately from the pressure gradient $\partial p/\partial z$ and the saturation S_{maxp}^i obtained numerically with DuMu^x :

$$\mathbf{q}_t = -\frac{k^i}{\mu_{nw}} \left\{ \left[k_{rn}(S_{maxp}^i)\rho_n + k_{rw}(S_{maxp}^i)\rho_w \right] g\mathbf{e}_z + \left[k_{rn}(S_{maxp}^i) + k_{rw}(S_{maxp}^i) \right] \frac{\partial p}{\partial z} \right\} \quad (3.44)$$

Figure 3.14a shows the vertical gravitational flux functions in the matrix and the inclusion (discontinuous lines) and the total convective flux functions including q_t given in

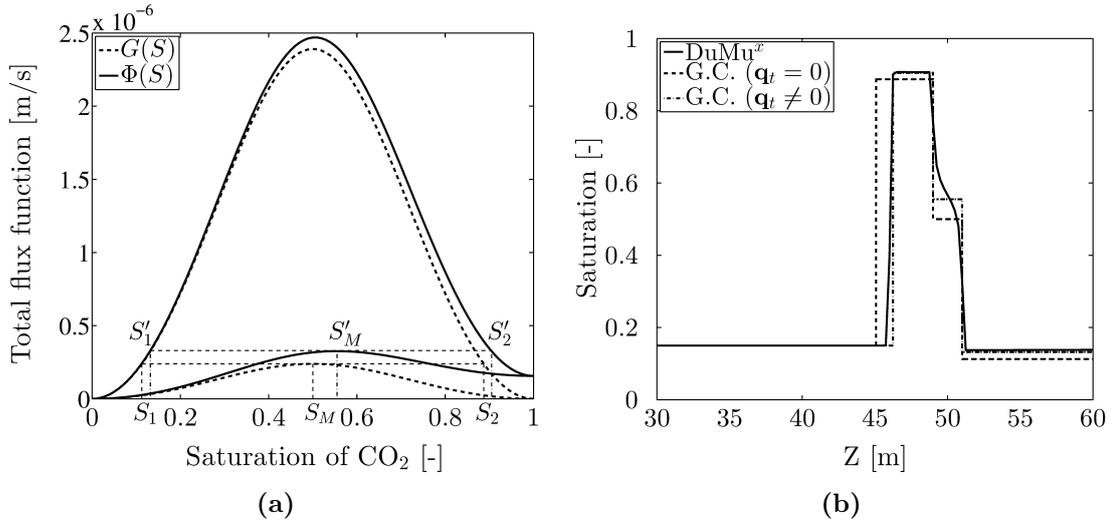


Figure 3.14 – Case 3 - Capillary-free case : (a) Vertical total flux function $\Phi(S)$ and vertical gravitational flux function $G(S)$ along the middle axis at the interface between the matrix and the inclusion ; (b) CO_2 saturation profile along the middle vertical axis - Comparison between numerical simulation result obtained with DuMu^x, analytical gravity current models with and without total velocity fluctuation for the case $S_i = 0.15$.

the equation (3.44) (continuous lines). The saturation within the gravity current is equal to the saturation S_{r1p}^m so that $\Phi^m(S_{r1p}^m) = \Phi^i(S_{maxp}^i)$. The saturation in the zone outside the gravity current of the matrix, S_{l1p}^m , is also deduced from the continuity condition of the total convective flux : $\Phi^m(S_{l1p}^m) = \Phi^i(S_{maxp}^i)$. The equation (3.53) in § 3.6 can be reused to predict the height of the gravity current noting that the longitudinal current flow $\bar{\Phi}_{io}$ is equal to $G^m(S_i) - \Phi^i(S_{maxp}^i)$.

Figure 3.14b shows a comparison between simulation results obtained with DuMu^x (continuous line) and analytical gravity current models with (dotted line) and without velocity fluctuation (discontinuous line). We note that : (i) the two gravity current models are in fairly good agreement with the simulated results (ii) taking into account velocity fluctuation gives a saturation profile closer to the numerical result, especially above the upper interface inclusion-matrix.

Figure 3.15 reports the temporal evolution of maximal gravity current height h_0 at the origin for different values of S_i . The continuous lines depict the numerical results whereas the discontinuous curves indicate the two-phase gravity current solutions with and without the viscous term. One can note the important overestimation of the gravity current height when the total velocity fluctuation is neglected. The difference between numerical and analytical solutions when velocity fluctuation is taken into account (figure 3.15b) is always lower than the height of a mesh cell. This mismatch should be certainly improved with an increasing numerical resolution.

Although the velocity fluctuation improves the prediction of the current height as well as the saturation distribution along a specific vertical axis, there is no analytical expression

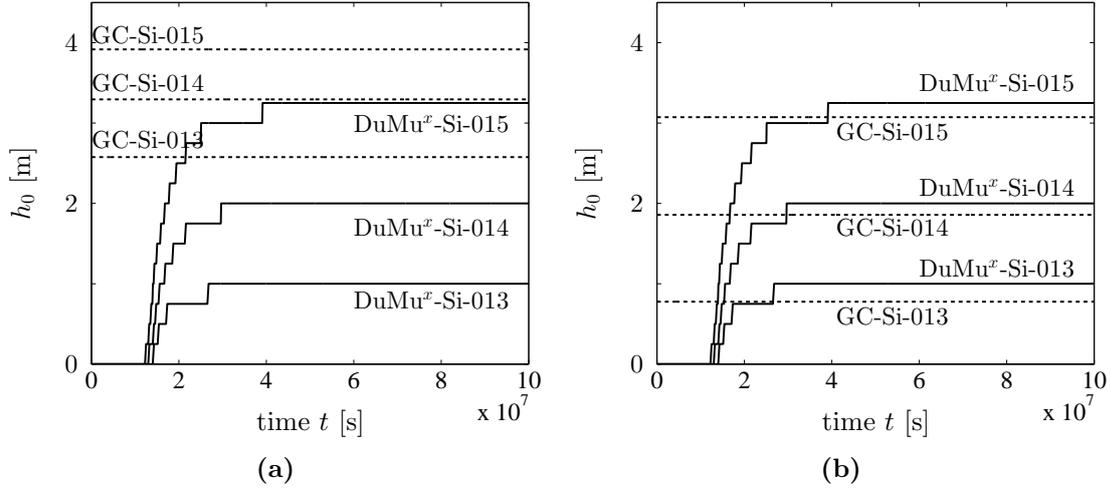


Figure 3.15 – Case 3 - Capillary-free case : maximal gravity current height at the origin h_0 . Comparison between numerical simulation result obtained with DuMu^x (continuous lines) and analytical gravity current models without (a) and with (b) the total velocity fluctuation.

of the local total velocity fluctuation. Thus, we consider the results of the gravity current model without velocity fluctuation as a first approximation.

3.4.3 Gravity-dominant flow

The present sub-section is devoted to the study of two-phase gravity current of buoyancy-dominant flow including capillary pressure, i.e. with a low capillary number N_c . Such a problem with impervious barrier has been discussed in Golding et al. (2011). Unlike the case of an impervious barrier where the fluid rises upwards from the current only through the edges at $x = \pm L$, the CO₂ can penetrate partially through the semi-permeable layer. The penetration takes place where the capillary pressure in the gravity current at $z' = 0$ exceeds the entry capillary pressure into the barrier p_e^i . In other words the vertical flow through Γ only occurs if the saturation S_0 overcomes the threshold saturation S_0^* that is determined from the equation (3.26). Due to the relationship between S_0 and the current height h expressed in the equation (3.35), the notion of the threshold saturation S_0^* involves the notion of a threshold height h_c . Woods and Farcas (2009) have studied the influence of the entry capillary pressure on the leakage of a single-phase gravity current through a permeable rock. However, in their work, the threshold height of single-phase gravity current h_c is equal to h_e and the impact of the ratio between the permeabilities of matrix and barrier is disregarded. For two-phase gravity currents, the permeability contrast must be taken into account and the threshold height h_c can be determined via the definition of critical saturation at the interface S_0^* . Note that the saturation S_0^* contains the information of the permeability contrast.

$$h_c = h_e \left[(1 - S_0^*)^{-1/\Lambda} - (1 - S_h)^{-1/\Lambda} \right]. \quad (3.45)$$

Let us define the dimensionless variables :

$$\hat{x} = x/L \text{ and } \hat{h} = h/H_{sc}, \quad (3.46)$$

where H_{sc} is the vertical height scale corresponding to the steady-state horizontal extent L introduced by Huppert and Woods (1995) :

$$H_{sc} = \sqrt{\frac{q\mu_n L}{\Delta\rho g k^m}}. \quad (3.47)$$

For convenience, in what follows, the variables without hat denote the dimensionless variables. Note that these dimensionless variables are different from those used in § 3.3.

Hence, the governing equation of the current height reads :

$$\frac{q}{L} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \mathcal{F}(hB) \right] + \Phi_{in} - \Phi_{out} = 0 \quad \text{for } h \geq h_c, \quad (3.48)$$

and

$$\frac{q}{L} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \mathcal{F}(hB) \right] + \Phi_{in} = 0 \quad \text{for } h < h_c, \quad (3.49)$$

where B is the Bond number

$$B \equiv \frac{\Delta\rho g H_{sc}}{p_e} = H_{sc}/h_e. \quad (3.50)$$

The solution of the equations (3.48) and (3.49) depends strongly on the Bond number B and consequently on the inclusion width $2L$ and the capillary number N_c . The outflux Φ_{out} in the equation (3.48) is assumed to be equal to the gravitational flux taken on the inclusion side of the interface :

$$\Phi_{out} = G^i(S_{inc}), \quad (3.51)$$

where the saturation S_{inc} is the saturation on the inclusion side and is determined via the matching condition of the capillary pressure at the interface :

$$\bar{p}_c^i(S_{inc}) = \bar{p}_c^m(S_0(z' = 0)), \quad (3.52)$$

with $S_0(z' = 0)$ related to the height of the gravity current h via the equation (3.35).

In other words, the outflux Φ_{out} can be viewed as a function of the gravity current height h . The latter is determined by solving the equations (3.48) and (3.49) numerically. For this purpose, a predictor-corrector algorithm (Ames, 2014) is used.

To validate the model, the setup of § 3.4.2 is considered with non-zero entry capillary pressures of the matrix and inclusion with $P_e^m/P_e^i = \sqrt{k^i/k^m}$. As a consequence, the behaviour of the two-phase flow at the interface is simultaneously governed by the continuity condition of capillary pressure and total flux as discussed in § 3.3. Unlike to the capillary-free case, even for a low influx, the CO_2 accumulates under the low-permeability barrier according to the capillary pressure continuity condition. As mentioned above, the behaviour of a two-phase gravity current at steady state depends strongly on the magnitude of the capillary effect. Capillary diffusion, on one hand, both lowers the saturation

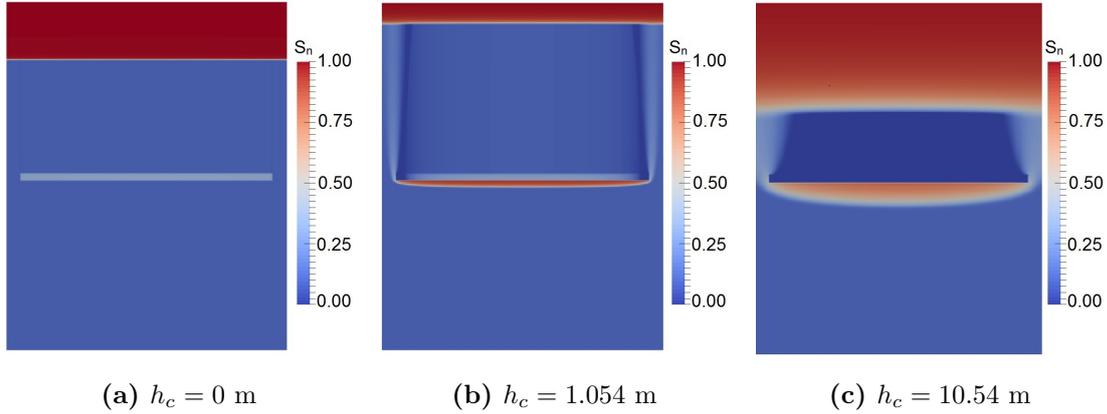


Figure 3.16 – Case 4 - Gravity-dominant case with $k^i/k^m = 0.10$ and $S_i = 0.10$ - CO₂ saturation distribution after a long time when CO₂ has reached the upper boundary of the domain. Simulation results are obtained with DuMu^x for different values of capillary number : $N_c = 0$ (left), $N_c = 0.01$ (medium), $N_c = 0.1$ (right). The corresponding threshold height of gravity current in the equation (3.45) are $h_c = 0, 1.054$ and 10.54 respectively.

within the gravity current and increases the vertical current height (Golding et al., 2011), and, on the other hand, increases the threshold height h_c of the gravity current. In general the current nearby the central axis of the inclusion is thicker than nearby the edges. When capillarity is important even the maximal height of gravity current at the origin is lower than h_c , the inclusion becomes impermeable to the CO₂ due to the capillary barrier. When capillarity is low the CO₂ can penetrate into the inclusion over a lateral zone of the interface $[-x_c, x_c]$ where x_c is the point at which $h = h_c$.

To evaluate the influence of capillary diffusion, different cases of increasing capillary number are considered $N_c = 0, 0.01, 0.1$. The permeability ratio is set to $k^i/k^m = 0.1$ which gives a threshold saturation value $S_0^* = 0.90$. The imposed saturation is $S_i = 0.10$. The threshold heights of the gravity currents (equation (3.45)) are $h_c = 0$ m, $h_c = 1.054$ m and $h_c = 10.54$ m for $N_c = 0, 0.01, 0.1$ respectively. Figure 3.16 shows the CO₂ distribution fed by an imposed saturation at the bottom $S_i = 0.10$ after a long time. For the capillary-free case $h_c = 0$, no accumulation beneath the barrier interface appears, the saturation within the inclusion can be determined from the continuity condition of the gravitational flux (figure 3.16a). Whatever the positive value of N_c , CO₂ accumulation takes place because of the capillary barrier. The CO₂ penetrates partially into the inclusion : in the region where the gravity current exceeds the threshold height h_c (figure 3.16b). In the case of a very small capillary number, e.g. $N_c = 0.01$, the threshold height h_c is very low and for a fairly high capillary number ($N_c = 0.1$) the threshold height h_c is fairly high. In this case, though the steady state has already reached, the maximal height of gravity current is insufficient to overcome the capillary barrier and the CO₂ cannot penetrate into the inclusion (figure 3.16c). The inclusion becomes therefore impermeable to CO₂.

Figure 3.17 shows a comparison between the simulation results and the semi-analytical solution using the gravity current approach for $k^i/k^m = 0.25$, $S_i = 0.10$ and $N_c = 0.1$,

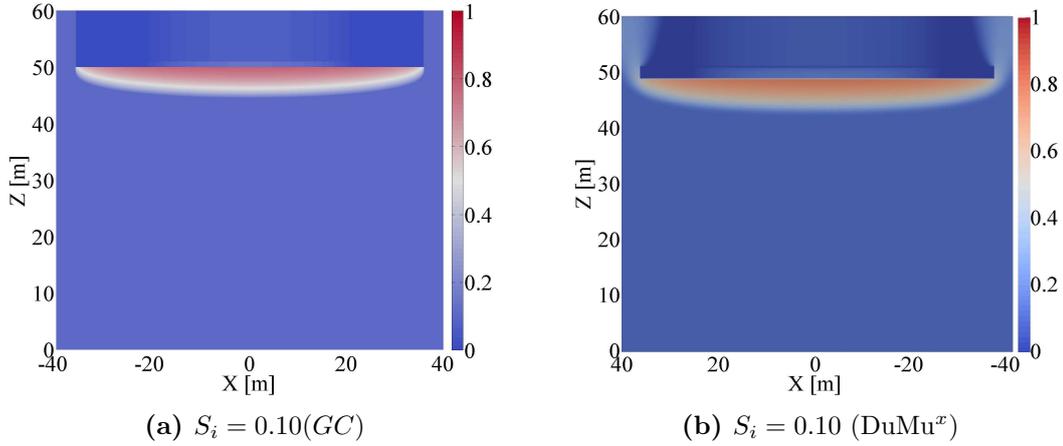


Figure 3.17 – Case 4 - Gravity-dominant case with $k^i/k^m = 0.25$ and $N_c = 0.1$: CO₂ distribution from $z = 0$ [m] to the observation surface $z = 60$ [m] reconstructed using gravity current method (left) and simulated with DuMux (right). A moderate influx $S_i = 0.10$ is imposed at the bottom of the system.

which results in $h_c = 4.7295$ [m]. The current height exceeds h_c on the section $[-18 \text{ m}, 18 \text{ m}]$ and the CO₂ can get through the interface. This phenomenon is well captured by the gravity current approach. It shows a fairly good agreement between the numerical and semi-analytical solutions for both the shape of the gravity current and the CO₂ distribution within the inclusion and the background matrix.

In Figure 3.18, we show the CO₂ saturation profile beneath the interface Γ and along the vertical central axis $x = 0$ for two values of boundary condition saturation $S_i = 0.10$ and $S_i = 0.15$. The numerical and semi-analytical profiles in both cases are in good agreement. The portion where the current height is greater than the threshold height is bounded by vertical line in figures 3.18a and 3.18c. The fairly identical CO₂ saturation profiles along the axis vertical $x = 0$ in figures 3.18b and 3.18d indicate that the gravity current approach is able not only to predict the area where the CO₂ penetrates into the inclusion but also to give a reference solution for the current height distribution beneath the low permeability barrier.

3.5 Conclusion

We studied the post-injection migration of a CO₂ plume in a heterogeneous porous media initially saturated with brine. Since CO₂ is lighter than brine, it rises upwards under the buoyancy effect. Though the capillary pressure acts locally at the pore scale, it must be taken into account to describe buoyant flow in heterogeneous media. The inclusion of the capillary pressure changes the dynamics of CO₂ at the interface between two porous media and this dynamics depends strongly on the relative magnitude of gravity and capillary forces. Our study is restricted to the case where the gravity force is dominant with respect to the capillary force, i.e. the gravity-dominant flow. In a first step, we investigated the gravity-dominant two-phase flow fed by a gravitational inflow flux associated

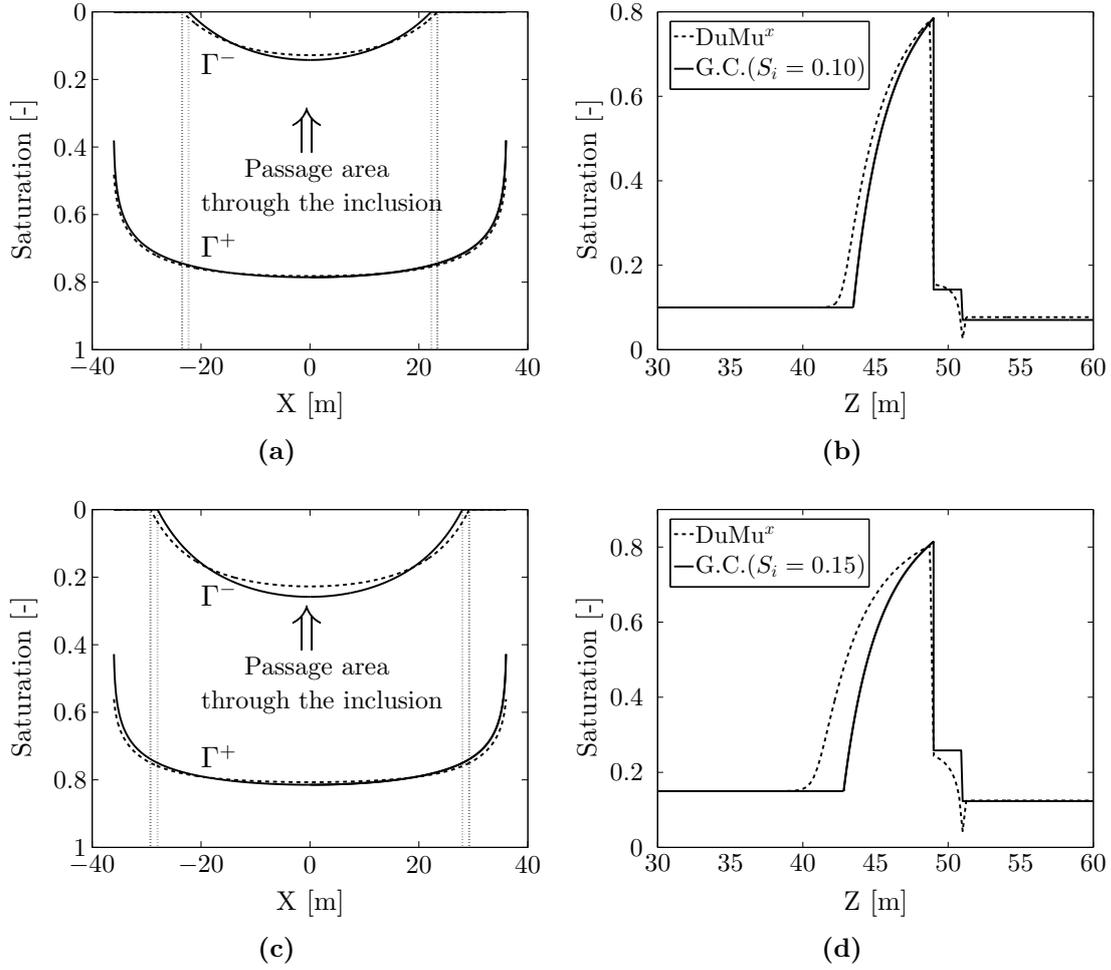


Figure 3.18 – Case 4 - Gravity-dominant case with $k^i/k^m = 0.25$ and $N_c = 0.1$: CO₂ saturation along the horizontal interface Γ on the lower matrix side Γ_m^- and on the upper inclusion side Γ_i^+ (a,c) and along the vertical central axis $x=0$ from $z=0$ to the inclusion location (b,d) for the case $S_i = 0.10$ [m] (top) and $S_i = 0.15$ [m] (bottom). DuMu^x results are represented by dotted lines and the gravity current model by solid lines.

with an imposed CO₂ saturation at the bottom of a one-dimensionnal vertical column. The column is filled with a piecewise constant homogeneous media which permeabilities of the two sub-domains are different. We showed that, at the interface between layers, (i) the dynamics of a two-phase flow is governed by two continuity conditions of the total flux and capillary pressure; and (ii) the capillary flux plays the role of a flux adjustment variable to respect the total flux continuity condition.

In a second step, the study is extended to the 2D case of a medium containing a single semi-permeable inclusion of finite extent. Two different cases, with and without capillary pressure, have been investigated. For the capillary-free case, we extended the classical gravity current model based on the vertical equilibrium (VE) assumption to explain the stratification of CO₂ beneath the low permeability layer due to the difference between

the inflow flux and the leakage flux at the interface with the inclusion. We observed that due to the limit of the VE assumption, the model remains valid only if the height of the current is much lower than its longitudinal extent. When the inflow flux is moderate, the semi-analytical model shows a good agreement with numerical simulations obtained with the open-source simulator DuMu^x. We also showed that for a given extent of the inclusion and a given width of the medium, there exist a threshold value of the inflow flux, *i.e.* of the imposed saturation at the bottom of the system, beyond which the gravity current does not reach an equilibrium state and grows indefinitely. When capillary pressure is taken into account, we showed that the CO₂ can only penetrate into the inclusion if the height of gravity current exceeds a threshold height which depends strongly on the value of the capillary number. We proposed a new model to describe this steady state. This gravity current model is able to capture fairly well not only the height of the CO₂ accumulation beneath the inclusion but also the CO₂ distribution within the current.

The proposed 2D two-phase gravity current model for the migration around and through a single finite thin low-permeability layer can be extended to the 2D axisymmetric case and the general 3D case without additional difficulties.

This work is supported by the project H-CUBE (Hydrodynamics, Heterogeneity, Homogenization) of the French National Agency of Research (ANR).

3.6 Appendix - Steady state gravity current under semi-permeable barrier fed by an an uniformly distributed source term for the capillary-free case

The governing dimensionless equation of such problem is given by :

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left(\hat{h} \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{x}} \right) = -1, \quad (3.53)$$

with $\hat{x} = x/L$; $\hat{h} = h/H^*$ where H^* denotes the corresponding vertical height scale :

$$H^* = L \sqrt{\frac{(\Phi_{in} - \Phi_{out})\mu_{nw}}{k\Delta\rho g k_{r_{nw}}(S_{gc})}}. \quad (3.54)$$

Integrating of the equation (3.53) from 0 to \hat{x} yields :

$$\frac{\partial \hat{h}^2}{\partial \hat{x}} - \frac{\partial \hat{h}^2}{\partial \hat{x}} \Big|_{\hat{x}=0} = -2\hat{x}. \quad (3.55)$$

Due to the symmetry of the problem, we deduce

$$\frac{\partial \hat{h}^2}{\partial \hat{x}} \Big|_{\hat{x}=0} = 0. \quad (3.56)$$

Hence, incorporating with the boundary condition $\hat{h} = 0$ if $\hat{x} = 0$, we deduce the height of gravity current beneath the impermeable or semi-permeable barrier :

$$\hat{h} = \sqrt{1 - \hat{x}^2} \quad (3.57)$$

If the inclusion is impermeable, the gravity current height in (3.57) is slightly different than Golding's result (Golding et al., 2011) for the case where gravity current is provided from an injection point.

$$\hat{h} = \sqrt{2(1 - \hat{x})} \quad (3.58)$$

3.7 Application of gravity current model in the 1D case

In this paragraph, we investigate the accuracy of the 1D model of two-phase flow under the vertical equilibrium assumption. We study the CO₂ accumulation, called *1D fictive current* beneath the interface from a coarse layer to a fine layer at steady state. The main case of interest is the case 2a in § 3.3.3 which ensures existence of gravity current at gravity currents at the steady state. The current is fed by fairly low imposed saturation $S_i \leq S_{i1}^p$ at the inlet of the coarse layer. To determine the CO₂ saturation distribution within the current, we need, first of all, to calculate the CO₂ saturations S_h and S_0 at $z' = h$ and S_0 at $z' = 0$ respectively. Obviously, one note that S_h is equal to the imposed saturation S_i . Furthermore, S_0 can be determined via the matching condition of capillary pressure and the continuity condition of the gravitational flux at the interface (see § 3.3.3). Once both S_h and S_0 are known, the height of the gravity current h is calculated from the equation (3.35). The CO₂ saturation within the 1D current is given by the equation (3.34). It should be noted that the application field of the model depends strongly on the validation of the vertical equilibrium assumption. For the 2D gravity current along impermeable barrier, the model is valid when the ratio between the current height h and the longitudinal extension of the gravity current L is much lower than 1 (Golding et al., 2011). To respect this assumption, the imposed saturation must not be too high resulting in a moderate gravitational influx into the domain. A similar condition must be applied to the 1D case to ensure the validation of gravity current model, *i.e.* a fairly low saturation is imposed at the domain inlet.

Figure 3.19a shows a comparison between the numerical result and the analytical solution of the gravity current approach using the vertical equilibrium (VE) assumption of CO₂ saturation profile at steady state for the case $k_u/k_l = 0.50$. Three different cases are studied with three values of the imposed saturation, $S_i = 0.15$, $S_i = 0.20$ and $S_i = 0.25$. For a low saturation, $S_i = 0.15$, the gravity current approach gives a fairly good prediction of CO₂ distribution within the domain. For $S_i = 0.20$, the numerical and analytical VE curves differ, mainly at the CO₂ accumulation beneath the interface but the agreement is still acceptable. For the last saturation $S_i = 0.25$, this value is very close to the limit saturation $S_{i1}^p = 0.26$ so that steady state is reached after a very long time, the CO₂ profiles diverge. In short, the gravity current approach fails to predict the saturation profile when the inflow is too high.

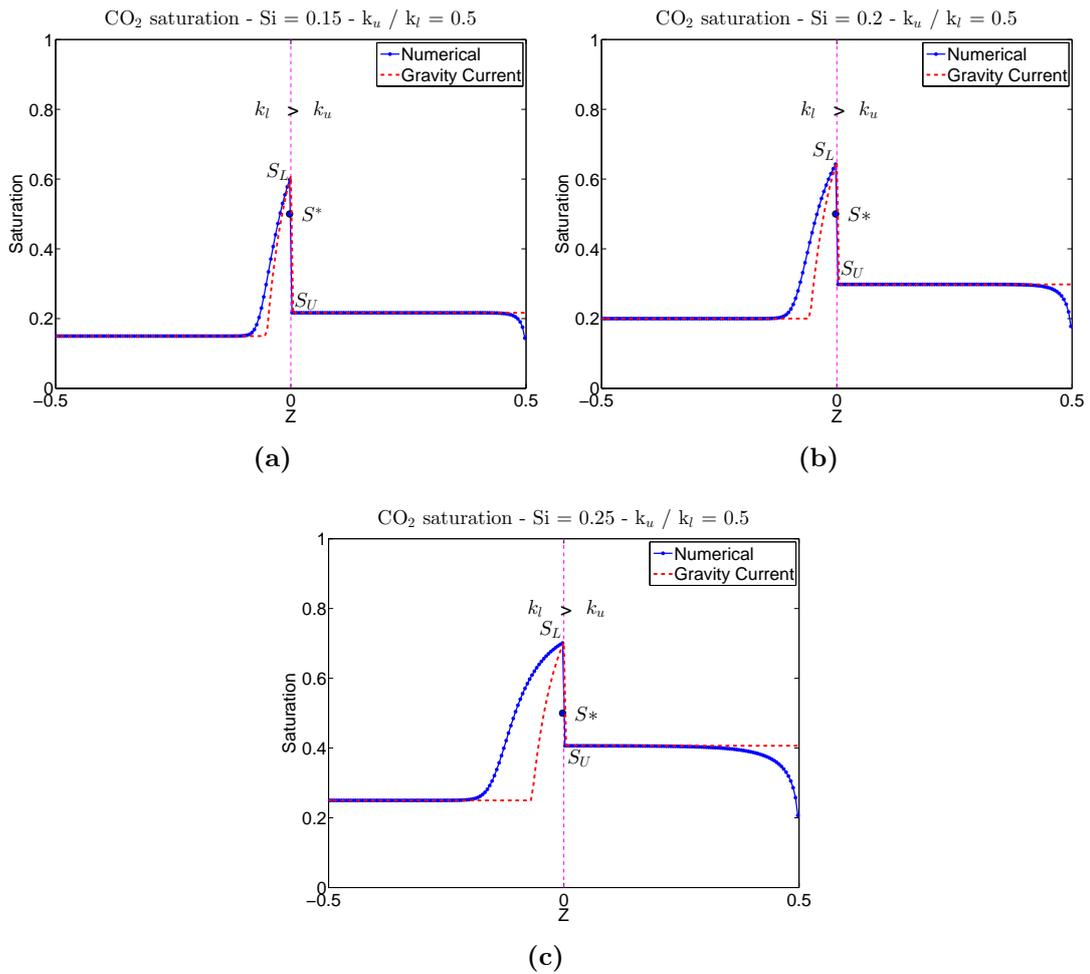


Figure 3.19 – CO₂ saturation profile at steady state for the case $k_u/k_l = 0.50$ with $S_i = 0.15$ (a), $S_i = 0.20$ (b) and $S_i = 0.25$ (c)

Bibliographie

- Acton, J. M., Huppert, H. E., and Worster, M. (2001). Two-dimensional viscous gravity currents flowing over a deep porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 440 :359–380.
- Adimurthi, Jaffré, J., and Gowda, G. V. (2004). Godunov-type methods for conservation laws with a flux function discontinuous in space. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42(1) :179–208.
- Ames, W. F. (2014). *Numerical methods for partial differential equations*. Academic press.
- Andreianov, B. and Cances, C. (2013). Vanishing capillarity solutions of buckley–leverett equation with gravity in two-rocks’ medium. *Computational Geosciences*, 17(3) :551–572.
- Brooks, R. and Corey, A. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Papers, Colorado State Universit.*
- Buzzi, F., Lenzinger, M., and Schweizer, B. (2009). Interface conditions for degenerate two-phase flow equations in one space dimension. *Analysis International mathematical journal of analysis and its applications*, 29(3) :299–316.
- Cances, C. (2008). *Two-phase flows in heterogeneous porous media : modeling and analysis of the flows of the effects involved by the discontinuities of the capillary pressure*. PhD thesis, Université de Provence - Aix - Marseille I.
- Cances, C. (2010a). Asymptotic behavior of two-phase flows in heterogeneous porous media for capillarity depending only on space. i. convergence to the optimal entropy solution. *SIAM journal on mathematical analysis*, 42(2) :946–971.
- Cances, C. (2010b). On the effects of discontinuous capillarities for immiscible two-phase flows in porous media made of several rock-types. *NHM*, 5(3) :635–647.
- Cancès, C., Gallouët, T., and Porretta, A. (2009). Two-phase flows involving capillary barriers in heterogeneous porous media. *Interfaces and Free Bound.*, 11 :239–258.
- Cavanagh, A. J. and Haszeldine, R. S. (2014). The sleipner storage site : Capillary flow modeling of a layered CO₂ plume requires fractured shale barriers within the utsira formation. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 21(0) :101 – 112.
- Flemisch, B., Darcis, M., Erbertseder, K., Faigle, B., Lauser, A., Mosthaf, K., Müthing, S., Nuske, P., Tatomir, A., Wolff, M., et al. (2011). Dumu^x : Dune for multi-{phase, component, scale, physics,...} flow and transport in porous media. *Advances in Water Resources*, 34(9) :1102–1112.
- Gasda, S. E., Nordbotten, J. M., and Celia, M. A. (2009). Vertical equilibrium with sub-scale analytical methods for geological co2 sequestration. *Computational Geosciences*, 13(4) :469–481.
- Golding, M. J., Neufeld, J. A., Hesse, M. A., and Huppert, H. E. (2011). Two-phase gravity currents in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 678 :248–270.

- Green, C. P. and Ennis-King, J. (2013). Residual trapping beneath impermeable barriers during buoyant migration of CO₂. *Transport in porous media*, 98(3) :505–524.
- Hayek, M., Mouche, E., and Mügler, C. (2009). Modeling vertical stratification of CO₂ injected into a deep layered aquifer. *Advances in Water Resources*, 32(3) :450 – 462.
- Hesse, M. and Woods, A. (2010). Buoyant dispersal of CO₂ during geological storage. *Geophysical Research Letters*, 37(1).
- Huppert, H. E. and Woods, A. W. (1995). Gravity-driven flows in porous layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 292 :55–69.
- Kaasschieter, E. (1999). Solving the buckley-leverett equation with gravity in a heterogeneous porous medium. *Computational Geosciences*, 3(1) :23–48.
- Kumar, A., Noh, M. H., Ozah, R. C., Pope, G. A., Bryant, S. L., Sepehrnoori, K., Lake, L. W., et al. (2005). Reservoir simulation of CO₂ storage in aquifers. *Spe Journal*, 10(03) :336–348.
- Langtangen, H. P., Tveito, A., and Winther, R. (1992). Instability of buckley-leverett flow in a heterogeneous medium. *Transport in Porous Media*, 9(3) :165–185.
- Matanovic, D. (2013). *Risk Analysis for Prevention of Hazardous Situations in Petroleum and Natural Gas Engineering*. IGI Global.
- Mikelic, A., van Duijn, C., and Pop, I. (2002). Effective equations for two-phase flow with trapping on the micro scale. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 62(5) :1531–1568.
- Mouche, E., Hayek, M., and Mügler, C. (2010). Upscaling of CO₂ vertical migration through a periodic layered porous medium : The capillary-free and capillary-dominant cases. *Advances in Water Resources*, 33(9) :1164 – 1175.
- Neufeld, J. A. and Huppert, H. E. (2009). Modelling carbon dioxide sequestration in layered strata. *Journal of Fluid Mechanics*, 625 :353–370.
- Nordbotten, J. M., Celia, M. A., and Bachu, S. (2005). Injection and storage of co₂ in deep saline aquifers : Analytical solution for CO₂ plume evolution during injection. *Transport in Porous media*, 58(3) :339–360.
- Pritchard, D., Woods, A. W., and Hogg, A. J. (2001). On the slow draining of a gravity current moving through a layered permeable medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 444 :23–47.
- Saadatpoor, E., Bryant, S. L., and Sepehrnoori, K. (2010). New trapping mechanism in carbon sequestration. *Transport in porous media*, 82(1) :3–17.
- Spannuth, M. J., Neufeld, J. A., Wettlaufer, J., and WORSTER, M. (2009). Axisymmetric viscous gravity currents flowing over a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 622 :135–144.
- Van Duijn, C. J., Eichel, H., Helmig, R., and Pop, I. S. (2007). Effective equations for two-phase flow in porous media : the effect of trapping on the microscale. *Transport in porous media*, 69(3) :411–428.

- Van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, 44(5) :892–898.
- Woods, A. W. and Farcas, A. (2009). Capillary entry pressure and the leakage of gravity currents through a sloping layered permeable rock. *Journal of Fluid Mechanics*, 618 :361–379.

Chapitre 4

Mise à l'échelle de la migration de CO_2 dans un système hétérogène périodique

Everything is theoretically impossible, until it is done.

Robert A. Heinlein

Sommaire

4.1	Contexte et système étudié	74
4.2	Détermination du flux gravitaire maximal	75
4.3	Développement asymptotique à double échelle	83
4.4	Flux total mis à l'échelle	90
4.5	Validation des modèles et discussion	108
4.6	Mise à l'échelle de la perméabilité relative	112
4.7	Conclusion	120
4.8	Appendice - Flux gravitaire effectif d'un milieu 1D avec variation de perméabilité, cas sans capillarité	121
	Bibliographie	123

4.1 Contexte et système étudié

Nous nous intéressons dans ce chapitre à la migration d'un panache de CO_2 dans un aquifère multicouche bi-dimensionnel. Cet aquifère consiste en des barrières de faible perméabilité, appelées ici "inclusions", et latéralement discontinues. Dès que le CO_2 rencontre des couches peu perméables lors de son ascension par gravité, il s'accumule sous ces couches et s'étale horizontalement vers leurs extrémités, puis continue à monter vers le haut à travers les "trous" entre les barrières. Ce type de milieu représente schématiquement les aquifères hétérogènes géologiques tels que la formation Utsira du site de séquestration de Sleipner. Un tel système de barrières décalées empêche la création de chenaux perméables verticaux qui permettent la montée beaucoup plus rapide du CO_2 à l'avant du front par rapport à l'arrière du front. Pour cette raison, ce type de milieu fait l'objet de différents travaux de recherche, notamment pour la validation des modèles analytiques (Hesse et Woods, 2010; Golding *et al.*, 2011; Szymkiewicz *et al.*, 2011). Comme dans ces travaux, nous supposons que le réseau de strates est périodique (Figure 4.1a). Dans le cas où les conditions aux limites sont également périodiques horizontalement, il nous faut seulement considérer la migration du CO_2 dans une colonne verticale telle que représentée sur la Figure 4.1b. Les dimensions du milieu étudié sont L_0 [m] pour la largeur et H [m] pour la hauteur. Le réservoir en CO_2 est supposé se trouver sous la colonne et en contact avec celle-ci, ce qui conduit à une saturation de fluide non mouillant constante. Cela assure la condition aux limites en bas de colonne. Tous les autres bords sont imperméables. Le CO_2 migre notamment sous l'effet de gravité.

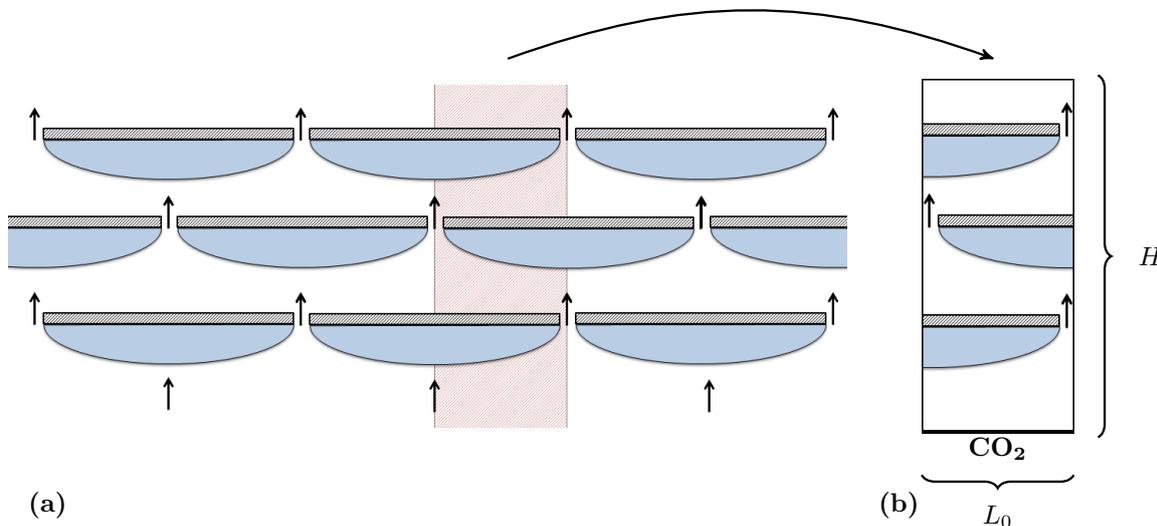


Figure 4.1 – Schéma d'écoulement du CO_2 dans un milieu bidimensionnel stratifié périodique (a). Le problème se simplifie en un écoulement dans une colonne verticale (b) sous réserve que les conditions initiales et aux limites soient également périodiques.

La question centrale qui se pose ici est :

Comment déterminer les lois et les paramètres effectifs du milieu homogène équivalent ?

Pour répondre à cette question, plusieurs problèmes sont abordés et traités. Nous montrons tout d’abord par une étude numérique que le flux gravitaire entrant dans le système des strates ne peut pas dépasser une valeur maximale (section 4.2). Dans la section 4.3, nous présentons un développement asymptotique à double échelle de l’écoulement du CO_2 dans un réseau périodique de strates. Cette analyse montre que pour calculer les paramètres effectifs du milieu équivalent, par exemple le flux total effectif, il nous faut résoudre un problème mathématique local non standard à petite échelle. Ce problème est lié à la stratification de CO_2 sous les inclusions et peut être résolu à l’aide de l’approche des courants de gravité (GC) présentée dans la section 4.4. La section 4.5 est réservée à la validation des modèles obtenus par la méthode GC pour différents cas, avec ou sans capillarité. Dans la section 4.6, nous discutons l’application de l’approche GC pour déterminer les perméabilités relatives effectives du CO_2 et de la saumure à grande échelle.

4.2 Détermination du flux gravitaire maximal

Avant d’étudier l’écoulement dans un réseau périodique de strates, il convient de clarifier une question essentielle : quel est le flux gravitaire maximal pouvant pénétrer dans le système. En effet, dans un tel milieu stratifié, la première inclusion joue un rôle de filtre qui ne laisse passer qu’un flux limité par une valeur maximale F_{thres} . La différence entre un flux imposé plus fort et F_{thres} se transforme en un reflux vers le bas sous cette strate. À notre connaissance, cette question de flux maximal n’a jamais été abordée dans la littérature. Dans cette section, nous déterminons F_{thres} pour différents cas de géométrie et de perméabilité de l’inclusion. Pour cette étude, un milieu monostrate représentant la première cellule sur la trajectoire de montée du CO_2 est suffisant.

4.2.1 Modèle de milieu stratifié équivalent

Ce modèle est basé sur l’idée de remplacer le milieu d’une strate isolée par un milieu parfaitement stratifié équivalent, pour lequel le flux gravitaire maximal peut être calculé par la condition de continuité comme dans le cas d’un écoulement unidimensionnel (Hayek *et al.*, 2009; Mouche *et al.*, 2010).

Le milieu équivalent comprend trois zones différentes : la zone filtre (A) qui couvre l’inclusion et deux zones de type (B) correspondant aux parties sous-jacente et sus-jacente de la matrice perméable (Figure 4.2). L’accumulation de CO_2 sous la barrière tend vers l’état permanent quand le flux total passant à travers la zone (A) et le flux entrant dans la colonne s’équilibrent. Le flux maximal F_{thres} dépend fortement de l’ouverture du système qui est égale à la largeur l de l’intervalle entre les côtés verticaux de l’inclusion et les bords latéraux du domaine.

La notion du flux maximal implique également la notion de perméabilité effective de la zone (A) (Figure 4.2b), ce qui est calculée par :

$$k_A^{eff} = \frac{F_{thres} k^m}{2L_0 \times G_{max}^m}, \quad (4.1)$$

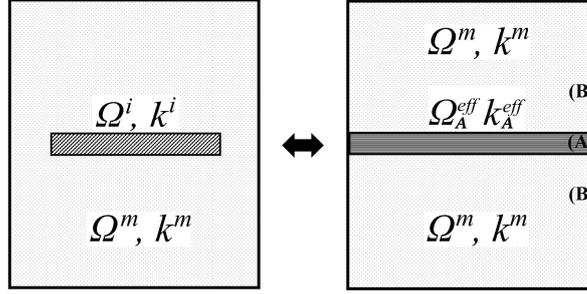


Figure 4.2 – Schéma du milieu initial, inclusion isolée (a), et décomposition en un milieu équivalent (b). k^i , k^m sont respectivement la perméabilité absolue de l’inclusion Ω^i et de la matrice Ω^m .

où G_{max}^m est le maximum du flux gravitaire dans la matrice, $G_{max}^m = \max\{G^m(S)\}, S \in [0, 1]$.

La perméabilité effective k_A^{eff} dépend fortement de la dimension de l’inclusion ainsi que de sa perméabilité absolue.

Dans ce qui suit, une analyse du flux maximal F_{thres} est effectuée pour deux cas différents : inclusion imperméable et semi-perméable.

4.2.2 Analyse du flux maximal

Comme le milieu est bidimensionnel, il convient donc de noter la présence de la fluctuation de vitesse totale qui peut contribuer au flux convectif dans l’équation (3.11). Néanmoins, en restant dans le cas de gravité dominante, le terme de vitesse est négligeable. Par conséquent, le flux maximal F_{thres} peut être calculé à partir de la condition de continuité du flux gravitaire total qui passe autour de l’inclusion, éventuellement à travers elle si sa perméabilité n’est pas nulle.

La saturation S_{thres} correspondant à F_{thres} via l’expression du flux gravitaire dans la matrice est également considérée comme la valeur maximale de la saturation imposée à l’entrée du domaine, ce qui pourrait conduire à l’état permanent de la stratification de CO₂ sous l’inclusion.

$$S_{thres} = (G^m)^{-1} \left(\frac{F_{thres}}{2L_0} \right). \quad (4.2)$$

4.2.2.1 Inclusions imperméables

Dans ce premier cas, on considère une inclusion imperméable, ce qui empêche le CO₂ de pénétrer à travers elle. Par conséquent, F_{thres} peut être calculé à partir du flux gravitaire maximal autorisé dans la matrice, *i.e.* à travers les trous entre l’inclusion et les bords de

la colonne :

$$F_{thres} = 2l \times G_{max}^m. \quad (4.3)$$

La perméabilité effective de la couche semi-perméable équivalente (A) est facilement calculée à partir de l'équation (4.1) :

$$k_A^{eff} = \frac{l}{L_0} k^m. \quad (4.4)$$

Notons ici que k_A^{eff} est en effet la moyenne arithmétique des perméabilités des sous-domaines. On observe également la proportionnalité entre la perméabilité k_A^{eff} et l'ouverture du système. À la limite $l \rightarrow 0$ ou $L \rightarrow L_0$, le système devient de plus en plus fermé et par conséquent imperméable : $k_A^{eff} \rightarrow 0$.

4.2.2.2 Inclusions semi-perméables

Considérons le cas d'une inclusion semi-perméable, $k^i \neq 0$ et $k^i/k^m \ll 1$. Le flux maximal pouvant pénétrer dans la zone (A) est en effet la somme des flux gravitaires à travers non seulement les intervalles mais aussi l'inclusion. En négligeant la fluctuation de vitesse, le flux total à travers l'inclusion équivaut donc à G_{max}^i , où G_{max}^i est le flux gravitaire maximal dans l'inclusion.

$$F_{thres} = 2l \times G_{max}^m + 2L \times G_{max}^i, \quad (4.5)$$

On peut constater facilement que la saturation $S_{l_1}^m$ (voir paragraphe 3.4.2.1, page 57) est plus faible que celle admissible S_{thres} correspondant à la valeur du flux admissible F_{thres} via l'équation (4.2) car $G_{max}^i < G_{max}^m$.

La perméabilité effective de la couche équivalente (A) est donnée par la moyenne arithmétique des perméabilités des intervalles et de celle de l'inclusion :

$$k_A^{eff} = \frac{l \times k^m + L \times k^i}{L_0}. \quad (4.6)$$

4.2.3 Validation par simulation numérique de l'hypothèse du flux maximal

Pour la validation numérique du modèle de flux maximal, nous reprenons la configuration du cas test 3 dans la section 3.4. Il s'agit de considérer la migration de CO₂ dans une colonne de 80 [m] fois 100 [m] de hauteur contenant une strate isolée de 2 [m] d'épaisseur et située au centre de la colonne. Afin d'étudier l'influence de la géométrie, deux valeurs de la largeur de l'inclusion sont considérées : $2L = 36$ [m] et $2L = 72$ [m]. De plus, par commodité, nous divisons les tests en deux sous-cas : inclusion imperméable (cas 3a) et semi-imperméable (cas 3b). Les paramètres pétrophysiques du cas test peuvent être trouvés dans la section 3.4.1, en page 56. Toutes les simulations sont effectuées à l'aide du code DuMu^x développé par l'Université de Stuttgart (Flemisch *et al.*, 2011). Ce code est "open source" et permet de simuler l'écoulement et le transport en milieux poreux.

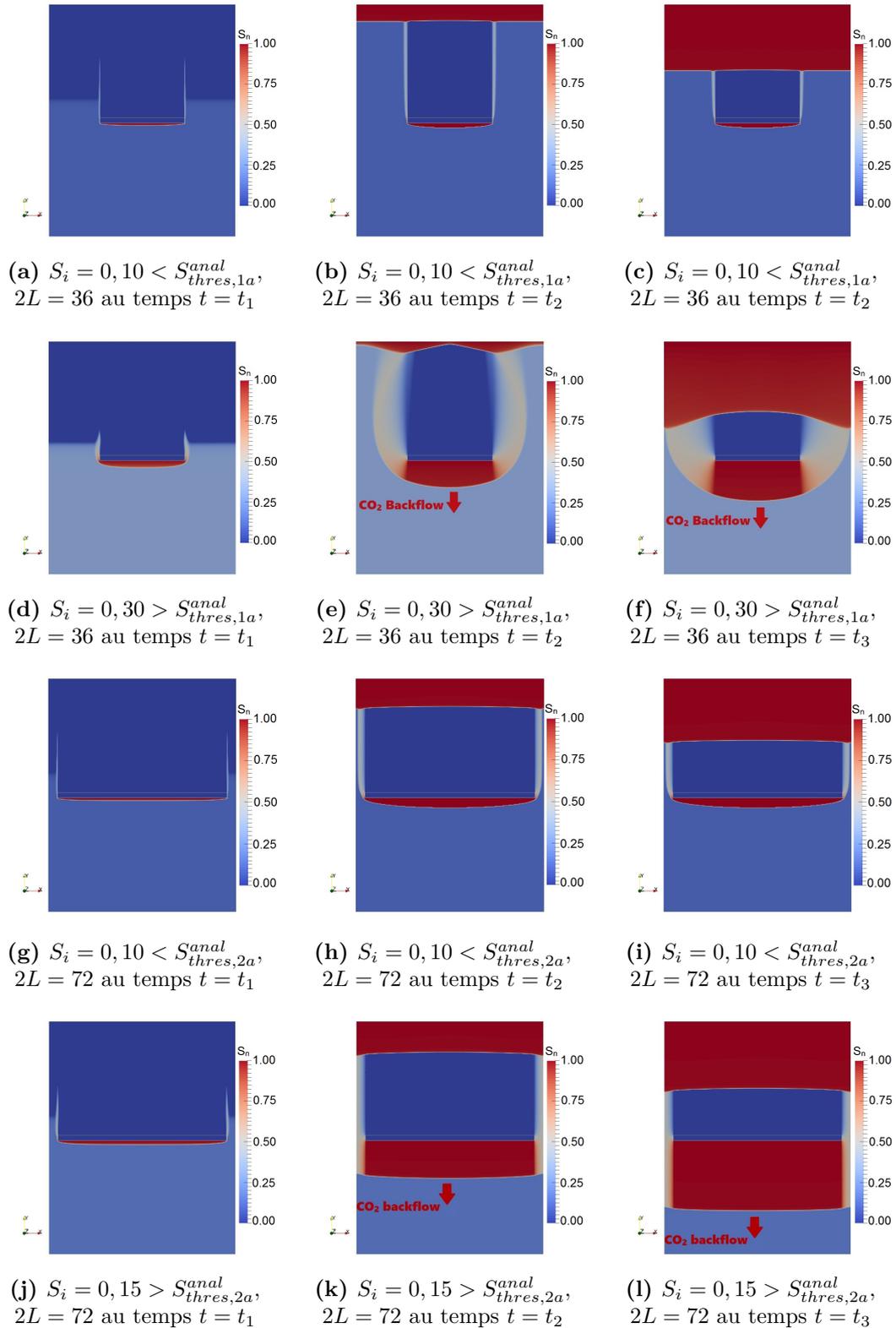


Figure 4.3 – Cas sans capillarité - Inclusion imperméable : distribution du CO_2 à un temps court t_1 (a,d,g,j) quand le front de CO_2 arrive à la barrière imperméable, à un temps intermédiaire t_2 (b,e,h,k) et à un temps relativement long t_3 (c,f,i,l). Dans chaque figure, le rectangle au centre du domaine indique les bords de l'inclusion.

4.2.3.1 Cas 3a : Inclusion imperméable

On considère dans un premier temps le cas d'une inclusion imperméable. Les saturations imposées admissibles correspondant à chaque géométrie et calculées d'après (4.2) sont respectivement égales à $S_{thres,1a}^{anal} = 0,1127$ pour $2L = 72$ [m] et $S_{thres,2a}^{anal} = 0,2816$ pour $2L = 36$ [m]. La Figure 4.3 montre les résultats des simulations numériques pour les deux géométries avec différentes valeurs de S_i . Pour les cas de faible saturation imposée, e.g. $S_i = 0,10$ pour $2L = 36$ [m] (Figures 4.3a, 4.3b, 4.3c) et pour $L = 72$ [m] (Figures 4.3g, 4.3h, 4.3i), les simulations révèlent que l'accumulation sous l'inclusion est en état permanent, ce qui est illustré par des courants de gravité similaires aux temps $t = t_2$ et $t = t_3$. Pour des saturations plus importantes que celle admissible, par exemple $S_i = 0,30$ (Figures 4.3d, 4.3e, 4.3f) pour $2L = 36$ [m] et $S_i = 0,15$ (Figures (4.3j, 4.3k, 4.3l) pour $2L = 72$ [m], on note que l'épaisseur du courant de gravité s'accroît sans cesse.

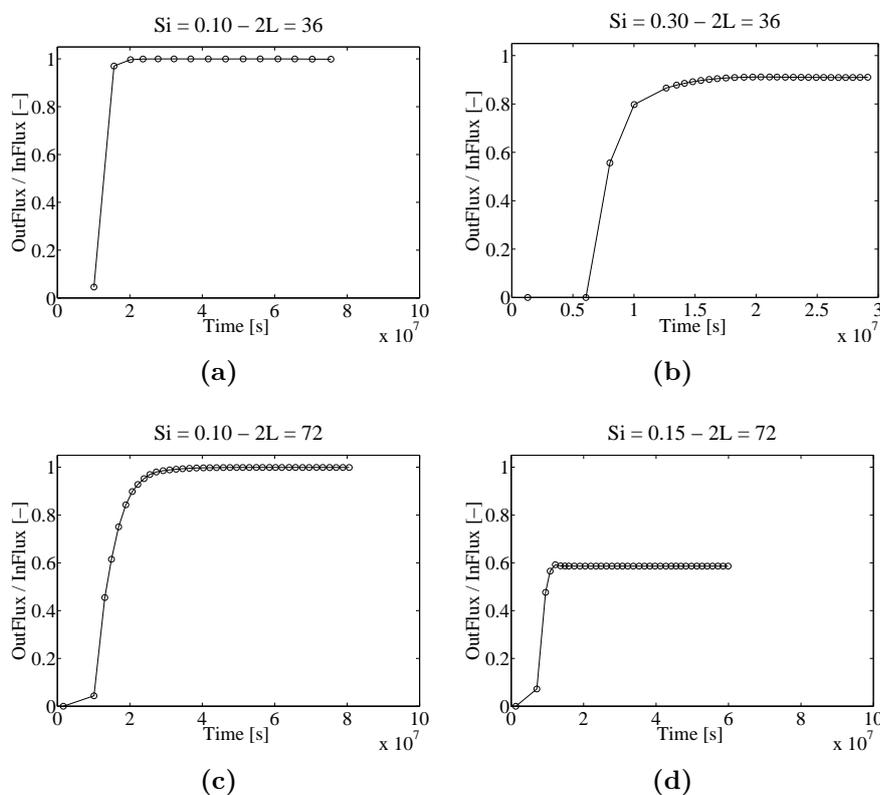


Figure 4.4 – Cas sans capillarité - Inclusion imperméable : rapport entre le flux sortant à travers les intervalles et le flux entrant en bas de la colonne dans le cas où $2L = 36$ [m] (haut) et $2L = 72$ [m] (bas). Résultats issus des simulations numériques à l'aide du code DuMu^x.

Pour entrer dans le détail, comparons le flux à travers une surface d'observation horizontale située au dessus de l'inclusion avec le flux imposé en bas de la colonne. La Figure 4.4 décrit l'évolution temporelle du rapport entre le flux sortant à travers la surface $Z = 60$ [m] calculé par DuMu^x et le flux imposé pour les deux cas de géométrie. Notons que l'effet du reflux provient du bord imperméable supérieur du domaine sur le flux sortant est enlevé, *i.e.* le rapport entre les flux est calculé jusqu'au moment où le reflux provient

du bord supérieur du milieu n'arrive pas encore à travers la surface d'observation.

On trouve facilement que ce rapport est égal à 1 pour des faibles flux imposés, e.g. $S_i = 0,10$, et inférieur à 1 pour les cas de fort flux entrant (e.g. environ 0.9 pour $S_i = 0,30$, $2L = 36$ [m] et environ 0,6 pour $S_i = 0,15$, $2L = 72$ [m]). Le flux maximal calculé par DuMu x s'élève à $F_{thres}^{1a} = 1,05 \times 10^{-4}$ [m 2 /s] pour $2L = 36$ [m] et $F_{thres}^{2b} = 1,91 \times 10^{-5}$ [m 2 /s] pour $2L = 72$ [m]. Ces valeurs sont en bon accord avec le flux gravitaire analytique calculé à partir de l'équation 4.3. La perméabilité effective de la zone (A) peut être déduite à partir des flux maximaux et équivaut à $k_A^{eff,1a} = 1,65 \times 10^{-12}$ [m/s] pour $2L = 36$ [m] et $k_A^{eff,2a} = 3 \times 10^{-13}$ [m/s] pour $2L = 72$ [m]. La Figure 4.5 montre les flux gravitaires de la zone équivalente (A) correspondant à deux perméabilités effectives $k_A^{eff,1a}$, $k_A^{eff,2a}$ avec ses limites $\bar{F}_{thres}^{1a} = F_{thres}^{1a}/2L_0$ et $\bar{F}_{thres}^{2a} = F_{thres}^{2a}/2L_0$.

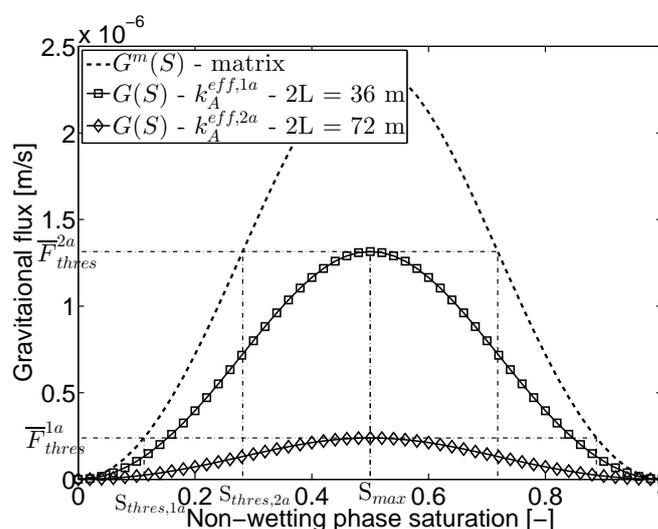


Figure 4.5 – Flux gravitaire de la zone équivalente pour $2L = 36$ [m] et $2L = 72$ [m]

4.2.3.2 Cas 3b : Inclusion semi-perméable

L'inclusion est maintenant semi-perméable. Les saturations imposées admissibles calculées analytiquement pour chaque géométrie valent $S_{thres,1b} = 0,1568$ pour $2L = 72$ [m] et $S_{thres,2b} = 0,2958$ pour $2L = 36$ [m]. Ces valeurs sont légèrement plus importantes que celles du cas de l'inclusion imperméable grâce au flux passant à travers l'interface.

Les Figures 4.6 et 4.7 montrent les résultats des simulations numériques dans deux cas de géométrie avec différentes valeurs de la saturation imposée. Pour les cas de faible flux entrant, e.g. $S_i = 0,10$ pour $2L = 36$ [m] (Figures 4.6a, 4.6b, 4.6c) et pour $L = 72$ [m] (Figures 4.7a, 4.7b, 4.7c), aucun courant de gravité n'apparaît car ce cas est dans la limite où la continuité du flux gravitaire peut être satisfaite (voir 3.4.2). Pour les saturations plus grandes mais toujours inférieures à celle admissible, $S_i = 0,20$ (Figures 4.6d, 4.6e, 4.6f) pour $2L = 36$ [m] et $S_i = 0,15$ (Figures 4.7d, 4.7e, 4.7f pour $2L = 72$ [m]), la simulation révèle que l'accumulation sous l'inclusion est à l'état permanent, ce

qui est illustré par des courants de gravité similaires aux temps $t = t_2$ et $t = t_3$. Pour les saturations plus importantes que celle admissible, $S_i = 0,30$ (Figures 4.6g, 4.6h, 4.6i) pour $2L = 36$ [m] et $S_i = 0,20$ (Figures 4.7g, 4.7h, 4.7i) pour $2L = 72$ [m], on note que l'épaisseur du courant de gravité s'accroît sans cesse.

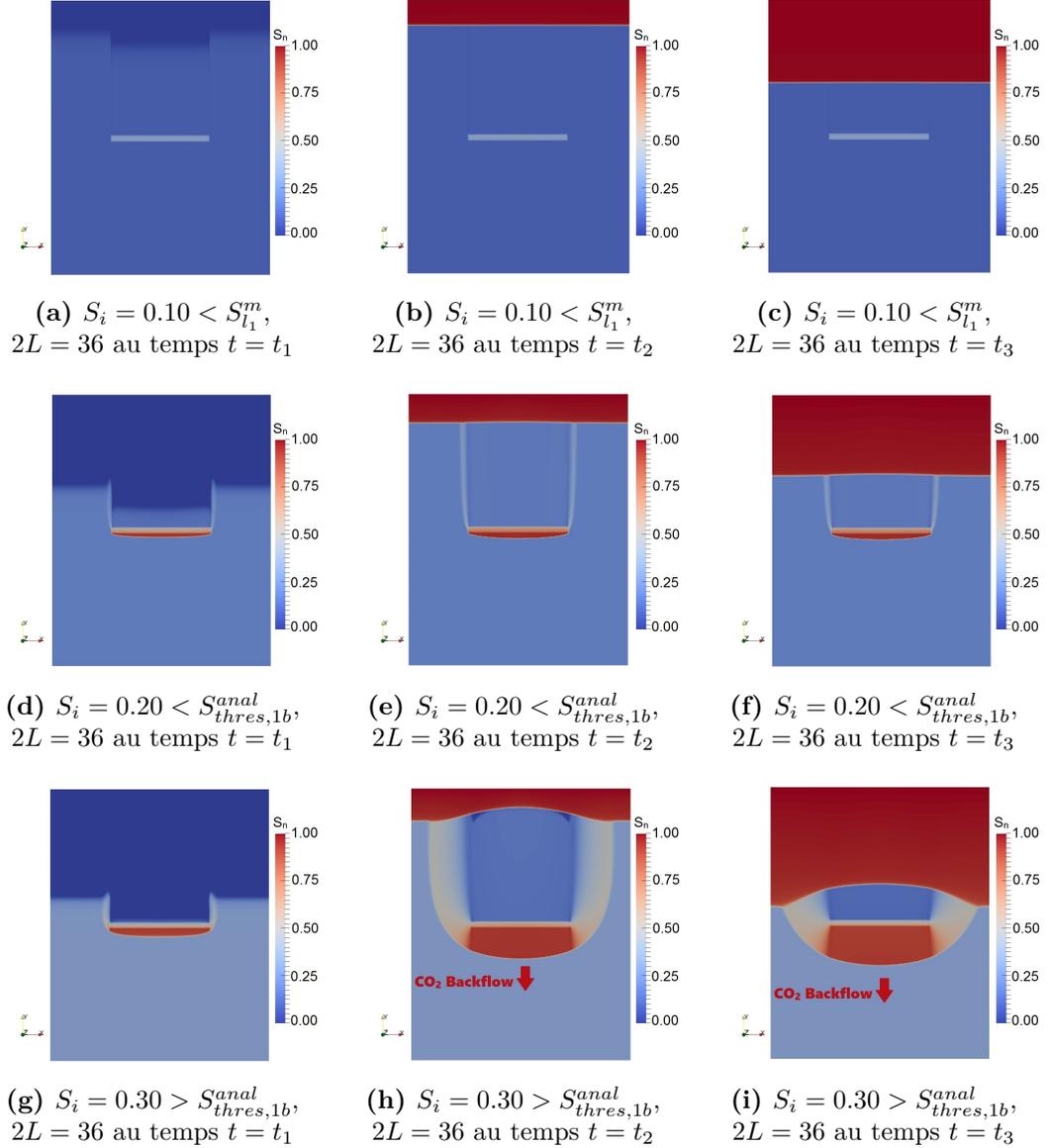


Figure 4.6 – Cas 3b - Cas sans capillarité - Inclusion semi-perméable : distribution du CO_2 à un temps court t_1 (a,d,g) quand le front CO_2 arrive à la barrière semi-perméable, à un temps intermédiaire t_2 (b,e,h) et à un temps relativement long t_3 (c,f,i) pour $2L = 36$ [m].

Une comparaison entre le flux à travers une surface d'observation horizontale située à $Z = 60$ [m] et le flux imposé en bas de la colonne est également effectué pour les deux cas de géométrie. Le résultat est présenté sur la Figure 4.8.

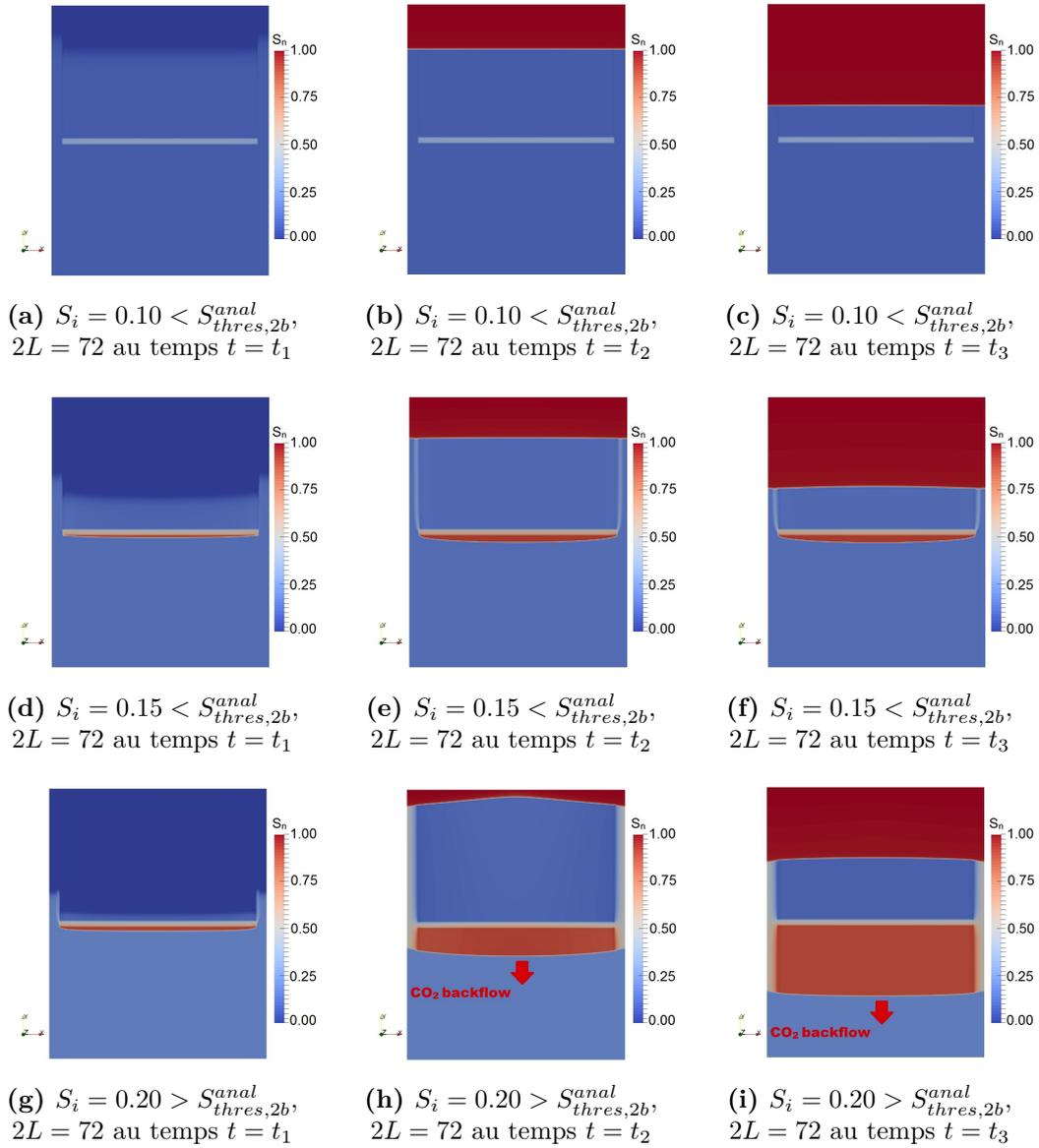


Figure 4.7 – Cas 3b - Cas sans capillarité - Inclusion semi-pérmeable : distribution du CO_2 à un temps court t_1 (a,d,g) quand le front de CO_2 arrive à la barrière semi-pérmeable, à un temps intermédiaire t_2 (b,e,h) et à un temps relativement long t_3 (c,f,i) pour $2L = 72$ [m].

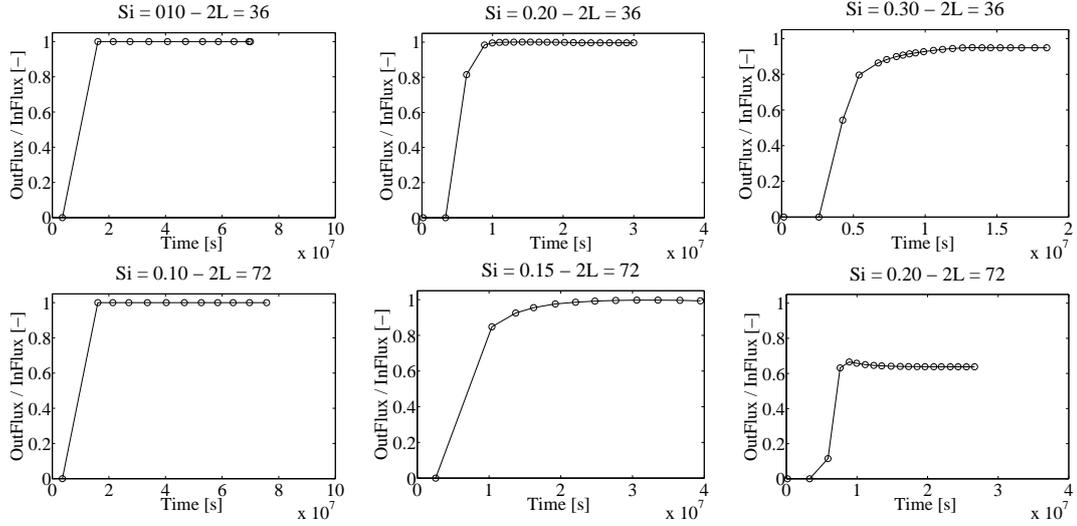


Figure 4.8 – Cas 3b - Cas sans capillarité - Inclusion semi-pérmeable : Comparaison entre le flux sortant à travers les intervalles et le flux entrant en bas de la colonne au cas où $2L = 36$ [m] (haut) et $2L = 72$ [m] (bas), en se basant sur les résultats des simulations numériques à l'aide du code DuMu^x.

On observe que les flux entrant et sortant s'équilibrent pour des saturations imposées faibles, aussi bien pour le cas sans courant de gravité ($S_i = 0,10$ pour les deux géométries) que pour le cas avec courant de gravité ($S_i = 0,20$ pour $2L = 36$ [m] et $S_i = 0,15$ pour $2L = 72$ [m]). À l'inverse, dans le cas d'un flux imposé élevé (e.g. $S_i = 0,30$ pour $2L = 36$ [m] et $S_i = 0,15$ pour $2L = 72$ [m]), seule une partie du flux entrant peut traverser la zone (A). Dans ce cas, le flux maximal calculé par DuMu^x s'élève à $F_{thres}^{1b} = 1,139 \times 10^{-4}$ [m²/s] pour $2L = 36$ [m] et $F_{thres}^{2b} = 3,640 \times 10^{-5}$ [m²/s] pour $2L = 72$ [m]. Comme dans le cas 3a, ces valeurs sont en parfait accord avec le flux gravitaire analytique calculé à partir de l'équation 4.5. La perméabilité effective de la zone (A) égale à $k_A^{eff,1b} = 1,785 \times 10^{-12}$ [m/s] pour $2L = 36$ [m] et $k_A^{eff,2b} = 5,7 \times 10^{-13}$ [m/s] pour $2L = 72$ [m]. La Figure 4.9 représente les flux gravitaires de la zone équivalente (A) pour les deux géométries. Les limites \bar{F}_{thres}^{1b} et \bar{F}_{thres}^{2b} sont également représentées dans cette figure.

4.3 Développement asymptotique à double échelle

Considérons maintenant la migration de CO₂ dans un système de strates périodiques comme celui représenté sur la en Figure 4.1. L'écoulement diphasique des fluides incompressibles est décrit par l'équation de continuité globale pour chaque phase :

$$\phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_\alpha = 0, \quad \alpha \in [nw, w], \quad (4.7)$$

où les vitesses des phases sont données par :

$$\mathbf{q}_\alpha = -k\lambda_\alpha (\nabla p_\alpha + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3), \quad \alpha \in [nw, w], \quad (4.8)$$

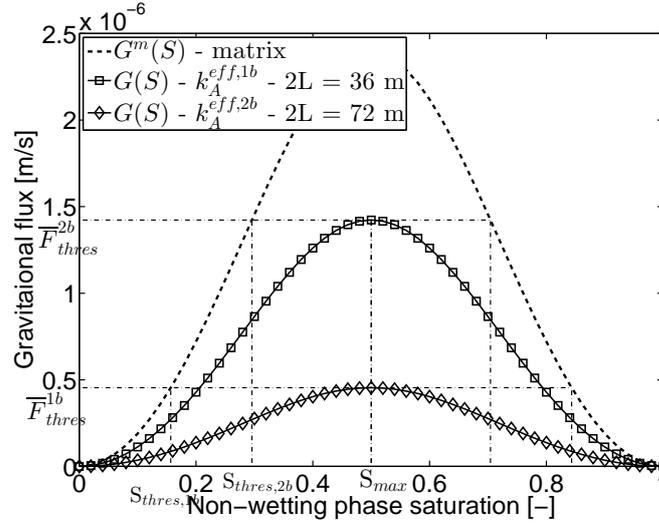


Figure 4.9 – Flux gravitaire de la zone équivalente pour $2L = 36$ [m] et $2L = 72$ [m]

avec $\lambda_\alpha = k_{r_\alpha}/\mu_\alpha$ la mobilité de la phase α , où $\alpha = w$ et $\alpha = nw$ désignent respectivement les fluides mouillant et non mouillant.

Commençons par rappeler l'équation de bilan global de la phase non-mouillante pour l'écoulement diphasique, présentée en page 43 (équation 3.15). Cette équation s'écrit sous la forme générale suivante :

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ \mathbf{q}_t f(S) + \frac{k}{\mu_w} \Lambda(S) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 - \frac{k}{\mu_w} \Lambda(S) \nabla p_c \right\} = 0, \quad (4.9)$$

où :

S - Saturation de la phase non-mouillante (CO₂) [-],

g - Constante gravitationnelle, $g = 9.81$ [m/s^2],

$\Delta \rho$ - Différence entre les densités des fluides, $\Delta \rho = \rho_w - \rho_{nw}$ [kg/m^3],

p_c - Pression capillaire [Pa],

k - Tenseur de perméabilité du milieu [m^2],

μ_w - Viscosité de la phase mouillante (saumure) [Pa.s],

\mathbf{q}_t - Vecteur de vitesse totale des phases, $\mathbf{q}_t = \mathbf{q}_w + \mathbf{q}_{nw}$,

p_c - Pression capillaire [Pa] : différence entre les pressions de phase, $p_c = p_{nw} - p_w$.

Les fonctions $f(S)$ et $\Lambda(S)$, qui représentent respectivement le flux fractionnaire et la fonction de mobilité totale respectivement, et définies par :

$$f(S) = \frac{k_{r_{nw}}(S)}{k_{r_{nw}}(S) + M k_{r_w}(S)}, \quad (4.10)$$

et

$$\Lambda(S) = \frac{k_{r_{nw}}(S) k_{r_w}(S)}{k_{r_{nw}}(S) + M k_{r_w}(S)}, \quad (4.11)$$

avec $M = \mu_{nw}/\mu_w$, le rapport de mobilité entre les deux fluides.

La vitesse totale \mathbf{q}_t pour l'ascension purement gravitaire dans le cas unidimensionnel est égale à zéro dans tout le domaine. Néanmoins, pour les écoulements bidimensionnels, elle existe localement et s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_t &= -k [\lambda_w(S)\nabla p_w + \lambda_{nw}(S)\nabla p_{nw}] - k [\lambda_w(S)\cdot\rho_w + \lambda_{nw}(S)\cdot\rho_{nw}] g\mathbf{e}_3 \\ &= -k [\alpha(S)\nabla p_w + \lambda_{nw}(S)\nabla p_c] - k\beta(S)g\mathbf{e}_3,\end{aligned}\quad (4.12)$$

où

$$\alpha(S) = \lambda_w(S) + \lambda_{nw}(S), \quad (4.13)$$

$$\beta(S) = \lambda_w(S)\rho_w + \lambda_{nw}(S)\rho_{nw}. \quad (4.14)$$

Il faut noter qu'en l'absence de terme source/puits, la divergence de la vitesse totale est égale à zéro :

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_t = 0. \quad (4.15)$$

Nous présentons par la suite le développement asymptotique à double échelle du problème de l'écoulement (équations (4.8), (4.12) (4.15)), ainsi que du problème de transport dans l'équation (4.9). Le principe de ces développements est exposé en détails dans le chapitre 2. Il ne sera donc pas rappelé ici. La Figure 4.10 montre la colonne étudiée ainsi que la cellule élémentaire du problème. Le petit paramètre du problème, noté ε , est égal au rapport de la hauteur d'une cellule sur la hauteur de la colonne $\varepsilon = \delta_c/H$. Il est donc inversement proportionnel au nombre de cellules dans le système.

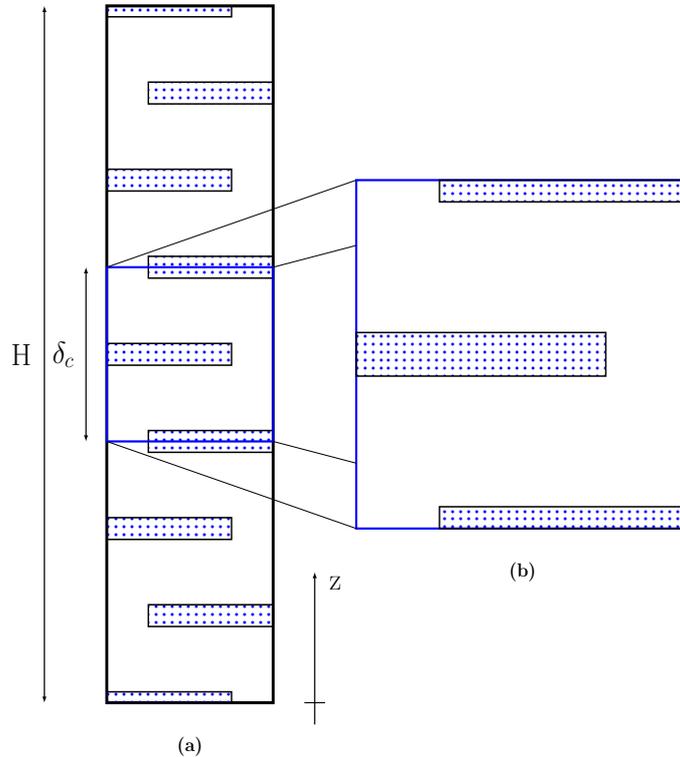


Figure 4.10 – La colonne périodique étudiée (a) et la zoom qui représente une cellule élémentaire de la colonne (b).

4.3.1 Problème de l'écoulement

En appliquant le développement asymptotique en ε , le gradient des variables macroscopiques devient $\nabla_{\mathbf{X}} \rightarrow \nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1}\nabla_{\mathbf{Y}}$. Le caractère \mathbf{Y} désigne la variable spatiale à petite échelle ou dans la cellule. Les fonctions de saturation S , telles que $f(S)$, $\Lambda(S)$ et $p_c(S)$ sont développées en séries de Taylor.

Ainsi, la forme asymptotique de l'équation (4.8) s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_\alpha &= \mathbf{q}_{\alpha,0} + \varepsilon\mathbf{q}_{\alpha,1} + \varepsilon^2\mathbf{q}_{\alpha,2} + \dots \\ &= -k \left[\lambda(S_0) + \varepsilon S_1 \lambda'(S_0) + \dots \right] \left[\left(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}} \right) (p_{\alpha,0} + \varepsilon p_{\alpha,1} + \dots) + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3 \right]. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Considérons l'équation (4.16) à différents ordres :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1} &: 0 = -k\lambda(S_0)\nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,0} \\ \varepsilon^0 &: \mathbf{q}_{\alpha,0} = -k\lambda(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}}p_{\alpha,0} + \nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,1} + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3) \\ \varepsilon^1 &: \mathbf{q}_{\alpha,1} = -k\lambda(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}}p_{\alpha,1} + \nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,2}) - kS_1\lambda'(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}}p_{\alpha,1} + \nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,2} + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3) \end{aligned}$$

où \mathbf{Y} et \mathbf{X} décrivent respectivement la physique à l'échelle de la cellule (la petite échelle), et celle à l'échelle de la colonne (la grande échelle). Le rapport entre la hauteur de la cellule et celle de la colonne est égal à $\varepsilon \ll 1$.

L'équation à l'ordre -1 conduit à $\nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,0} = 0$, ce qui signifie que la pression des phases à l'ordre 0 est constante dans une cellule élémentaire.

L'intégration de l'équation à l'ordre 0 sur tout le domaine Ω nous donne :

$$\langle \mathbf{q}_{\alpha,0} \rangle = - \langle k\lambda(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}}p_{\alpha,0} + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3) \rangle - \langle k\lambda(S_0)\nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,1} \rangle. \quad (4.17)$$

Comme le terme $(\nabla_{\mathbf{X}}p_{\alpha,0} + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3)$ est indépendant de \mathbf{Y} , la vitesse moyenne de phase s'écrit alors :

$$\langle \mathbf{q}_{\alpha,0} \rangle = - \langle k\lambda(S_0) \rangle (\nabla_{\mathbf{X}}p_{\alpha,0} + \rho_\alpha g \mathbf{e}_3) - \langle k\lambda(S_0)\nabla_{\mathbf{Y}}p_{\alpha,1} \rangle. \quad (4.18)$$

Le premier terme du côté droit de l'équation (4.18) représente la vitesse d'écoulement de la phase α dans un milieu homogène équivalent dont la conductivité apparente est la valeur moyenne arithmétique dans toute la cellule. Le deuxième terme est une correction de vitesse liée à la pression à l'ordre 1.

Le développement de la vitesse totale nous permet de déterminer la relation entre $p_{\alpha,1}$ et les variables à l'ordre 0 :

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_t &= \mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon\mathbf{q}_{t,1} + \varepsilon^2\mathbf{q}_{t,2} + \dots \\ &= -k [\alpha(S)\nabla p_w + \lambda_{nw}(S)\nabla p_c] - k\beta(S)g\mathbf{e}_3 \\ &= -k [\alpha(S_0) + \varepsilon S_1\alpha'(S_0) + \dots] \left[\left(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}} \right) (p_{w,0} + \varepsilon p_{w,1} + \dots) \right] - \\ &\quad - k [\lambda_{nw}(S_0) + \varepsilon S_1\lambda'_{nw}(S_0) + \dots] \left[\left(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}} \right) (p_c(S_0) + \varepsilon S_1 p'_c(S_0) + \dots) \right] - \\ &\quad - k [\beta(S_0) + \varepsilon S_1\beta'(S_0) + \dots] g\mathbf{e}_3 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Les équations de \mathbf{q}_t à différents ordres s'écrivent :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1} & : 0 = -k [\alpha(S_0) \nabla_{\mathbf{Y}} P_{w,0} + \lambda_{nw}(S_0) \nabla_{\mathbf{Y}} p_c(S_0)] \\ \varepsilon^0 & : \mathbf{q}_{t,0} = -k [\alpha(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}} p_{w,0} + \nabla_{\mathbf{Y}} p_{w,1}) + \\ & \quad + \lambda_{nw}(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}} p_c(S_0) + \nabla_{\mathbf{Y}} S_1 p'_c(S_0)) + \beta(S_0) g \mathbf{e}_3] \end{aligned}$$

On note que :

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_t = 0 \Rightarrow (\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}}) \cdot (\mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots) = 0. \quad (4.20)$$

À l'ordre ε^{-1} , on a $\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} = 0$, donc

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot [k\alpha(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}} p_{w,0} + \nabla_{\mathbf{Y}} p_{w,1}) + k\lambda_{nw}(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}} p_c(S_0) + \nabla_{\mathbf{Y}} S_1 p'_c(S_0)) + k\beta(S_0) g \mathbf{e}_3] = 0. \quad (4.21)$$

En l'absence de capillarité, cette équation s'écrit

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot [k\alpha(S_0) (\nabla_{\mathbf{X}} p_{w,0} + \nabla_{\mathbf{Y}} p_{w,1}) + k\beta(S_0) g \mathbf{e}_3] = 0. \quad (4.22)$$

L'équation (4.22) ne peut être résolue analytiquement que dans le cas où la saturation S_0 ne dépend pas des variables microscopiques \mathbf{Y} . Dans le cas contraire, l'équation (4.22) doit être résolue numériquement.

4.3.2 Problème du transport

Considérons maintenant le problème du transport de la saturation en fluide non mouillant donné par l'équation (4.9). Le type de transport dépend de l'importance relative des termes de flux gravitaire, capillaire et visqueux. Pour le déterminer, il faut tout d'abord adimensionner les équations. Les quantités caractéristiques sont choisies de façon similaire au cas unidimensionnel traité en page 18. Les variables spatiales $\mathbf{X} = (X_1, X_3)$ sont adimensionnées par la hauteur H du domaine car nous nous intéressons au comportement à grande échelle des fluides. Le temps caractéristique est celui de l'écoulement de CO_2 lié à la gravité. La perméabilité absolue dans la matrice est choisie comme la valeur caractéristique k_0 du domaine. Puisque l'on est dans le cas sans injection, qui conduit à une vitesse totale macroscopique nulle, la vitesse d'une phase U est prise comme valeur typique de la vitesse totale. Dans les équations suivantes, les caractères avec chapeau désignent les variables adimensionnées.

$$\hat{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}}{H}, \hat{k} = \frac{k}{k_0}, \hat{t} = \frac{k_0 g \Delta \rho}{\phi H \mu_w} t, \hat{\mathbf{q}}_t = U \mathbf{q}_t \quad (4.23)$$

Le nombre capillaire N_c et le nombre visqueux N_q sont donnés par :

$$N_c = \frac{\sigma}{g(\rho_w - \rho_{nw})H} \sqrt{\frac{\phi}{k_0}} = \frac{P_e}{g \Delta \rho H}, \quad (4.24)$$

$$N_q = \frac{U \mu_w}{g \Delta \rho k_0}. \quad (4.25)$$

Dans ce qui suit, les variables sans chapeau désignent par commodité les variables adimensionnées. L'équation (4.9) est réécrite sous forme adimensionnée comme suit :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \Phi(S) = 0, \quad (4.26)$$

où le flux non-dimensionnel de la phase non mouillante, $\Phi(S)$, est donné par

$$\Phi(S) = N_q \mathbf{q}_t f(S) + k \Lambda(S) \mathbf{e}_3 - N_c k \Lambda(S) \nabla p_c(S), \quad (4.27)$$

où $p_c(S) = J(S)/\sqrt{k}$, avec $J(S)$, la fonction de Leverett.

On note que le problème dépend forcément des nombres adimensionnés. Vu que la dérivation du modèle est basée sur le développement en $\varepsilon = \delta_c/H$, les nombres adimensionnés doivent être comparés à ce paramètre. Dans ce travail, nous envisageons le cas où l'effet de gravité est dominant à grande échelle. Les valeurs du nombre capillaire N_c et du nombre visqueux N_q sont donc très petites :

$$N_q \approx \varepsilon^1, \quad N_c \approx \varepsilon^1. \quad (4.28)$$

Comme seul le flux diffusif est proportionnel au gradient de pression, le nombre capillaire est donc dépendant de la taille du domaine d'observation. Par conséquent, l'ordre en ε du nombre capillaire N_c dans l'équation (4.28) implique que la gravité et la pression capillaire s'équilibrent à petite échelle.

La saturation, la pression des phases ainsi que la vitesse totale sont développées en séries de puissances de ε comme suit :

$$S = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k S_k, \quad (4.29)$$

$$p_\alpha = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k p_{\alpha,k}, \quad i = w, nw. \quad (4.30)$$

$$\mathbf{q}_t = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \mathbf{q}_{t,k}, \quad (4.31)$$

En appliquant le développement asymptotique en ε , la divergence des variables macroscopiques devient $\nabla_{\mathbf{X}} \rightarrow \nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}}$. Le caractère \mathbf{Y} désigne la variable spatiale à petite échelle ou dans la cellule. Les fonctions de saturation S , telles que $f(S)$, $\Lambda(S)$ et $p_c(S)$ sont développées par des séries de Taylor.

La forme asymptotique de l'équation (4.26) s'écrit alors :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \frac{\partial S_k}{\partial t} + \left(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}} \right) \cdot \Phi(S) = 0. \quad (4.32)$$

En utilisant l'équation (4.28), le flux total développé $\Phi^\varepsilon(S)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \Phi^\varepsilon &= \Phi_0 + \varepsilon \Phi_1 + \varepsilon^2 \Phi_2 + \dots \\ &= \varepsilon \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \mathbf{q}_{t,k} [f(S_0) + \varepsilon S_1 f'(S_0) + \dots] + k [\Lambda(S_0) + \varepsilon S_1 \Lambda'(S_0) + \dots] \mathbf{e}_3 \\ &\quad - \varepsilon k [\Lambda(S_0) + \varepsilon S_1 \Lambda'(S_0) + \dots] \left(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}} \right) [p_c(S_0) + \varepsilon S_1 p'_c(S_0) + \dots]. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Considérons l'équation (4.33) aux différents ordres :

$$\begin{aligned}\varepsilon^0 & : \quad \Phi_0 = k\Lambda(S_0)\mathbf{e}_3 - k\Lambda(S_0)\nabla_{\mathbf{Y}}p_c(S_0) \\ \varepsilon^1 & : \quad \Phi_1 = \mathbf{q}_{t,0}f(S_0) + S_1k\Lambda'(S_0)\mathbf{e}_3 - k[\Lambda(S_0)\nabla_{\mathbf{X}}p_c(S_0) + \Lambda(S_1)\nabla_{\mathbf{Y}}p_c(S_0)]\end{aligned}$$

En général, on définit $\sum_{k=0}^n \varepsilon^k \langle S_k \rangle$ comme l'approximation au $n^{\text{ème}}$ ordre pour la saturation, où la parenthèse angulaire désigne la moyenne dans tout le domaine :

$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} (\cdot) d\Omega.$$

Un modèle à grande échelle est également appelé modèle au $n^{\text{ème}}$ ordre s'il décrit le comportement de la saturation au $n^{\text{ème}}$ ordre (Panfilov et Floriat, 2004). Considérons l'équation (4.32) à ordre ε^{-1} et ε^0 :

$$\varepsilon^{-1} \quad : \quad \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_0 = \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot [k\Lambda(S_0)\mathbf{e}_3 - k\Lambda(S_0)\nabla_{\mathbf{Y}}p_c(S_0)] = 0, \quad (4.34)$$

$$\varepsilon^0 \quad : \quad \frac{\partial S_0}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \Phi_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_1 = 0. \quad (4.35)$$

L'intégration de l'équation (4.35) nous donne l'équation de transport mise à l'échelle à l'ordre zéro. Notons que le troisième terme s'annule après intégration du fait des conditions de périodicité $\frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{Y}} \Phi_1 d\Omega = \langle \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_1 \rangle = 0$. L'équation mise à échelle à ordre ε^0 s'écrit :

$$\frac{\partial \langle S_0 \rangle}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \Phi_0 \rangle = 0. \quad (4.36)$$

On constate que l'effet de capillarité locale est prise en compte directement dans la fonction $\langle \Phi_0 \rangle$ via la résolution de l'équation (4.34). L'objectif étant de déterminer les paramètres effectifs du milieu homogène équivalent, la fonction du flux effectif $\langle \Phi(S_0) \rangle$ est tout d'abord calculée. En supposant que S_0 dépend uniquement des variables macroscopiques \mathbf{X} , on déduit à partir de l'équation (4.34) que $\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot k\mathbf{e}_3 = 0$, ce qui n'est pas correct car la cellule est hétérogène. Par conséquent, la saturation à ordre ε^0 dépend impérativement à la fois des variables macroscopique \mathbf{X} et microscopique \mathbf{Y} :

$$S_0 = S_0(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, t). \quad (4.37)$$

Autrement dit, même à l'ordre ε^0 , la continuité du flux Φ_0 et de la pression capillaire conduisent à une discontinuité de saturation à l'interface entre la matrice et l'inclusion. Cette remarque est similaire à celle faite dans le cas "balance" de l'écoulement unidimensionnel dans un milieu parfaitement stratifié présenté dans la section 2.3.2. Alors que dans le cas unidimensionnel la résolution du problème local peut être effectuée directement sans hypothèses simplificatrices grâce à la simplicité de la géométrie, cela est beaucoup plus difficile dans le cas multidimensionnel.

Afin de diminuer le coût de la résolution numérique du problème de l'écoulement (4.34) dans une cellule 2D, la méthode des courants de gravité (GC) est utilisée. Cette approche

peut s'appliquer pour déterminer la carte de saturation dans la cellule, correspondant à un flux entrant donné. La répétition de cette démarche pour différentes valeurs de flux nous permet de tracer la courbe de flux effectif en fonction de la saturation moyenne dans la cellule. Néanmoins, il faut noter que cette approche n'est valide que quand la hauteur de courant est beaucoup plus faible que son extension longitudinale (hypothèse de Boussinesq). Elle ne permet pas non plus de décrire la distribution de saturation du CO₂ dès que le courant de gravité franchit le bord de la cellule. Malgré ces inconvénients, l'approche des courants de gravité est la clé pour déterminer de façon analytique la stratification locale du CO₂ sous l'inclusion peu perméable.

4.4 Flux total mis à l'échelle

Dans cette section, nous présentons la résolution du problème local, *i.e.* à petite échelle, à l'aide de l'approche des courants de gravité (GC), ce qui nous servira ensuite pour la construction de la courbe de flux total effectif. Afin d'étudier l'effet de la capillarité à l'échelle locale, nous considérons progressivement le cas simplifié sans capillarité et le cas plus complexe avec capillarité. Deux types d'inclusion sont étudiés : inclusions imperméables et perméables.

Tout d'abord, nous commençons par le cas simplifié où la capillarité est négligée. La théorie de l'approche GC classique est, dans un premier temps, appliquée pour les inclusions imperméables et, dans un second temps, étendue pour étudier le réseau des inclusions perméables.

Ensuite, l'effet de la capillarité sur l'écoulement diphasique dans un réseau de strates imperméables est étudié. L'approche des courants de gravité diphasiques de Golding *et al.* (2011) peut s'appliquer pour déterminer non seulement la forme des courants de gravité mais aussi la distribution de saturation de CO₂ dans ces courants.

Finalement, nous discutons l'extension de l'approche de Golding *et al.* (2011) au cas des inclusions perméables, où la pression d'entrée dans les inclusions joue un rôle important sur le trajet de la migration de CO₂ ainsi que sur la distribution de CO₂ dans la cellule à l'état permanent. Ce travail s'appuie sur les résultats du chapitre 3.

4.4.1 Inclusions imperméables - sans capillarité ($\mathbf{k}^i = \mathbf{0}$, $\mathbf{p}_c = 0$)

Envisageons dans un premier temps le cas où la capillarité est absente. Un tel problème pour les inclusions imperméables est largement étudié dans la littérature en utilisant l'approche GC. Celle-ci permet d'estimer la quantité de CO₂ immobilisée par piégeage résiduel sous les barrières imperméables (voir, par exemple Green et Ennis-King (2013)). Cependant, dans ce modèle, la source est ponctuelle et se trouve toujours au centre des barrières, ce qui n'est pas le cas des réseaux de strates discontinues.

Dans ce qui suit, nous établissons un modèle simple prenant en compte la localisation du point source qui alimente le courant de gravité. Grâce à la condition de périodicité du

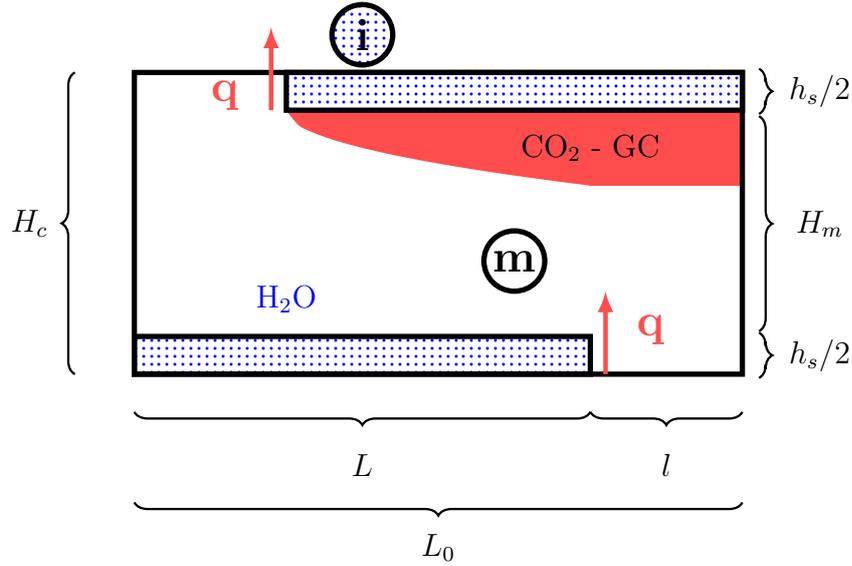


Figure 4.11 – Cellule d’un milieu stratifié périodique constitué d’inclusions imperméables. Les caractères i, m désignent l’inclusion et la matrice. h_s est l’épaisseur de l’inclusion, H_c la hauteur de la cellule et H_m représente l’écart vertical entre deux inclusions consécutives. $2L$ et L_0 représentent respectivement la largeur des inclusions et de la colonne étudiée. $l = L_0 - L$ est une moitié de l’écart horizontal entre deux inclusions avoisinantes.

milieu, le problème se ramène à celui de la stratification dans le domaine représenté sur la Figure 4.11. Notons que ce domaine ne représente que le quart d’une cellule périodique. Le courant de gravité est alimenté par celui situé sous la strate inférieure immédiate avec un flux entrant q positionné au point $x = l$. Le CO_2 se fuit de la cellule à travers l’extrémité de l’inclusion. Après un temps suffisant, le flux entrant et le terme de fuite s’équilibrent et le courant de gravité tend vers un état permanent.

Le flux total q entrant dans le domaine est calculé à partir de la saturation imposée S_i qui est constante tout le long la base de la colonne.

$$q = L_0 \times K^* \times \Lambda(S_i), \quad (4.38)$$

avec

$$K^* = \frac{k\Delta\rho g}{\mu_{nw}}. \quad (4.39)$$

L’équation exprimant le courant de gravité à l’état permanent peut être déduite à partir de l’équation (3.40) :

$$-K^* \frac{\partial}{\partial x} \left(h \frac{\partial h}{\partial x} \right) = q\delta(x-l) - q\delta(x-L_0), \quad (4.40)$$

où δ est la distribution de Dirac :

$$\delta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x = 0, \\ 0 & \text{si } x \neq 0. \end{cases} \quad (4.41)$$

Le système d'équations est complété par les conditions aux limites :

$$h = 0 \text{ à } x = L. \quad (4.42)$$

L'intégration de l'équation (4.40) de 0 à x donne :

$$h \frac{\partial h}{\partial x} = -\frac{q}{K^*} \times \mathbb{1}_{(x-l \geq 0)}, \quad (4.43)$$

où

$$\mathbb{1}_{x \geq 0} = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (4.44)$$

En intégrant l'équation (4.43) de 0 à x encore une fois, on obtient :

$$\int_0^x \frac{\partial h^2}{\partial x'} dx' = \int_0^x -\frac{2q}{K^*} \mathbb{1}_{(x-l \geq 0)} dx'. \quad (4.45)$$

On déduit la solution de la hauteur des courants de gravité h comme suit :

- Si $x \leq l$: $\Rightarrow h = h_0$, avec $h_0 = [h]_{[x=0]}$,
- Si $x > l$:

$$\Rightarrow h^2 - h_0^2 = -\frac{2q}{K^*}(x - l). \quad (4.46)$$

La condition aux limites en $x = L$ fournit :

$$h_0 = \sqrt{\frac{2q(L-l)}{K^*}} \quad (4.47)$$

$$\Rightarrow h = \sqrt{h_0^2 - \frac{2q}{K^*}(x-l)} = \sqrt{\frac{2q(L-x)}{K^*}} \quad (4.48)$$

d'où finalement,

$$h = \begin{cases} \sqrt{\frac{2q(L-l)}{K^*}} & \text{si } x \leq l \\ \sqrt{\frac{2q(L-x)}{K^*}} & \text{si } l < x \leq L \end{cases} \quad (4.49)$$

Le volume total du CO_2 dans le courant de gravité est égal à :

$$\begin{aligned} V_{CO_2} &= h_0 l + \int_l^L \sqrt{\frac{2q(L-x)}{K^*}} dx \\ &= l \sqrt{\frac{2q(L-l)}{K^*}} - \left[\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2q}{K^*}} (L-x)^{\frac{3}{2}} \right]_l^L \\ &= \sqrt{\frac{2q(L-l)}{K^*}} \left[l + \frac{2}{3}(L-l) \right] = \frac{2L+l}{3} \sqrt{\frac{2q(L-l)}{K^*}}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

La saturation moyenne est déterminée en prenant le rapport entre le volume de CO₂ et le volume effectif d'une cellule V_e :

$$\bar{S} = \frac{V_{CO_2}}{V_e} = \frac{2L + l}{3V_e} \sqrt{\frac{2q(L - l)}{K^*}}. \quad (4.51)$$

La courbe du flux effectif en fonction de la saturation moyenne est construite en suivant les étapes décrites ci-dessous :

- 1) Pour chaque valeur de saturation imposée S_i , déterminer le flux entrant total q via l'équation (4.38).
- 2) Calculer la hauteur maximale du courant de gravité h_0 à partir du flux entrant obtenu dans l'étape 1 via l'équation (4.47).
- 3) Déterminer la saturation moyenne :

$$\bar{S} = \begin{cases} (2L + l)h_0/3/V_e & \text{si } h_0 < H_m, \\ (2L + l)H_m/3/V_e & \text{si } h_0 \geq H_m. \end{cases} \quad (4.52)$$

La Figure 4.12 montre la reconstruction du champ de saturation pour trois géométries différentes dont la largeur des inclusions est différente et pour différentes valeurs de la saturation imposée. Une cellule typique de 10 m de hauteur et 40 m de largeur est utilisée dans tous les cas. L'épaisseur des inclusions est aussi fixée à 2 m. On trouve sur la Figure 4.12 que pour des saturations imposées fortes, e.g. $S_i = 0,10$, le courant devient trop épais par rapport à son extension longitudinale. Notons qu'en général, l'approche GC est valide quand la hauteur h_{gc} et la longueur l_{gc} des courants de gravité satisfont $h_{gc}/l_{gc} \ll 1$. On constate également que, pour la même valeur de S_i , lorsque le système s'ouvre (l croissant), la hauteur maximale du courant de gravité décroît. Cela signifie que le volume total de CO₂ piégé sous les inclusions et la saturation moyenne \bar{S} deviennent également plus faibles.

La Figure 4.13 illustre l'influence de la largeur de l'inclusion sur la hauteur maximale du courant de gravité, et par conséquent sur la saturation moyenne dans la cellule, pour des valeurs de la saturation imposée S_i variant entre 0,05 et 0,30. Il faut noter que si la longueur L est inférieure à $L_0/2$, le réseau d'inclusions crée des chenaux verticaux le long desquels le CO₂ peut circuler préférentiellement. Dans ce cas, le courant de gravité n'apparaît que sous l'inclusion la plus basse. Cette géométrie ne présentant pas d'intérêt. Nous considérons par la suite que la longueur L est supérieure à $L_0/2$.

La Figure 4.13a montre que toutes les courbes de hauteur maximale du courant varient non linéairement lorsque L/L_0 est proche de 0,5, et tout particulièrement, pour les saturations $S_i = 0,05$ et $S_i = 0,10$. Lorsque L/L_0 tend vers 1, la hauteur maximale ne dépasse pas la hauteur H_m pour $S_i < 0,15$. Pour $S_i > 0,15$, l'épaisseur du courant de gravité dépasse l'écart vertical entre deux inclusions consécutives dès que les inclusions

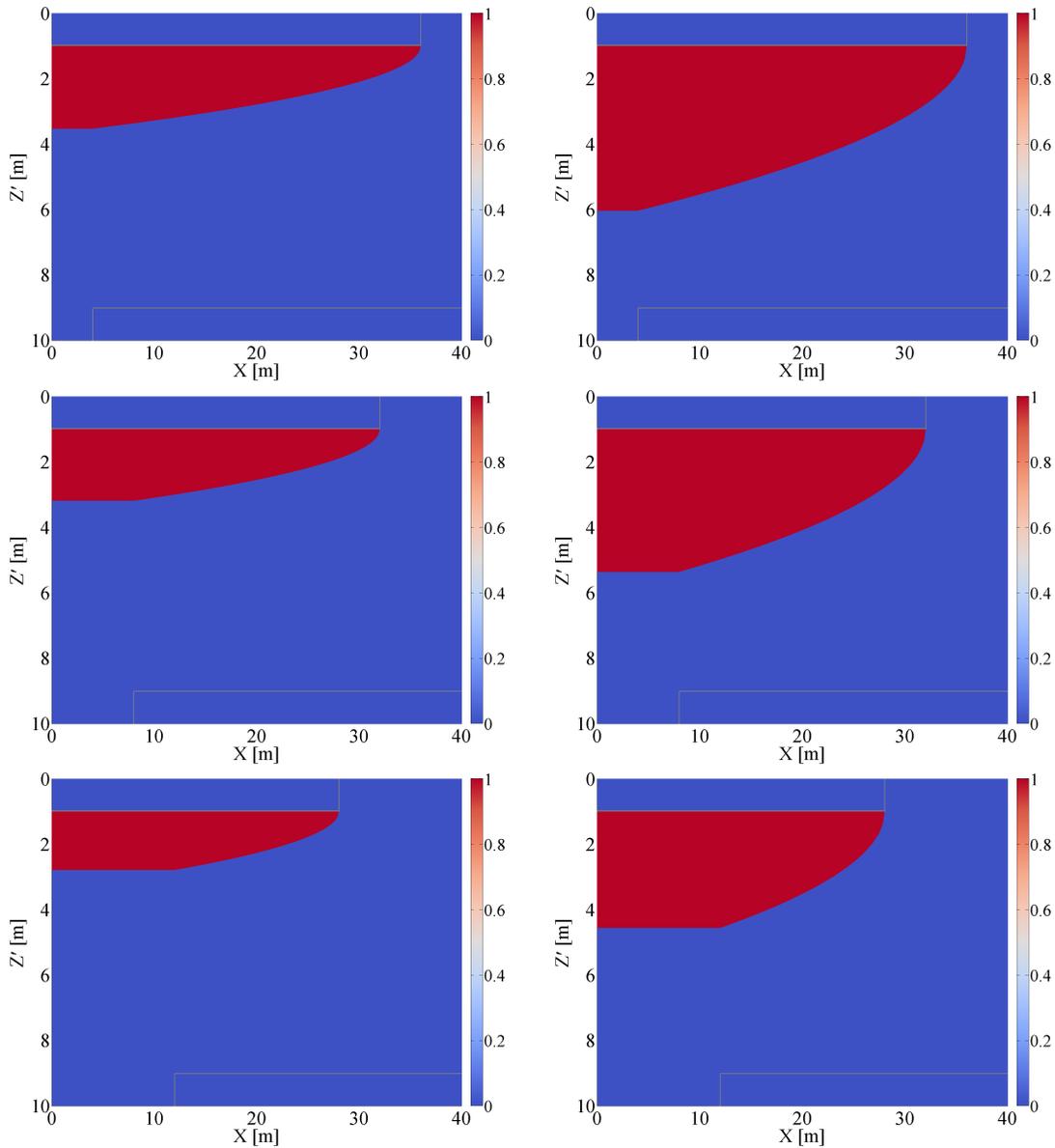


Figure 4.12 – Cas sans capillarité - Inclusions imperméables : reconstruction de la solution du problème local à petite échelle obtenue par l’approche des courants de gravité : $2L = 72$ [m] (haut), $2L = 64$ [m] (milieu) et $2L = 56$ [m] (bas) pour la saturation imposée $S_i = 0,05$ (à gauche) et $S_i = 0,10$ (à droite) . Les traits en gris représentent les interfaces entre la matrice et les inclusions.

sont suffisamment longues.

La variation de la saturation moyenne dans la cellule, \bar{S} , en fonction du rapport L/L_0 est présentée sur la Figure 4.13b. Les résultats sont cohérents avec ceux obtenus pour h_0 pour les faibles saturations imposées, $S_i = 0,05$ et $0,10$. On observe dans ce cas une augmentation non-linéaire de \bar{S} lorsque L/L_0 croît. Pour $S_i > 0,10$, les courbes sont constituées d’une partie non-linéaire lorsque L/L_0 est faible, et linéaire dans le cas

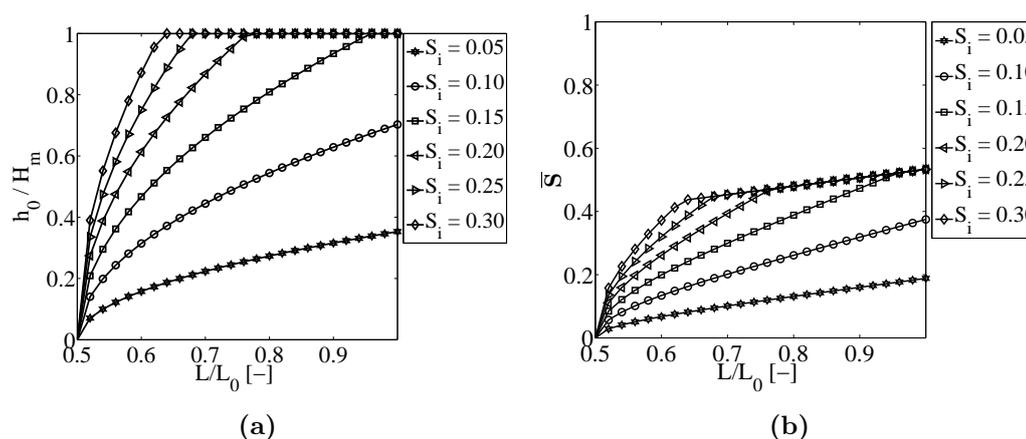


Figure 4.13 – Influence de la longueur de l'inclusion sur la hauteur maximale du courant de gravité et sur la saturation moyenne \bar{S} dans le cas $L_0 = 40m$.

contraire. Cette variation linéaire représente l'accroissement linéaire de la saturation \bar{S} lorsque la hauteur h_0 est constante dans l'équation (4.51).

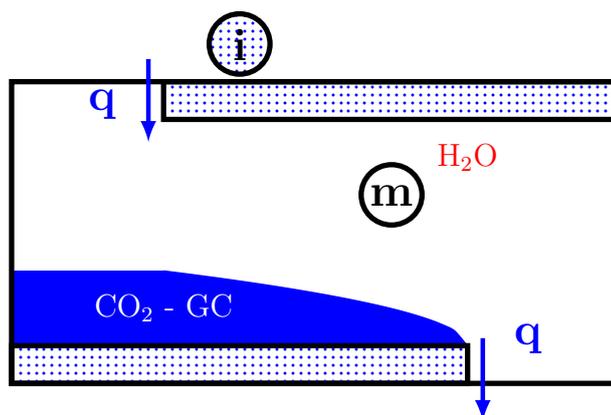


Figure 4.14 – Sketch de la migration descendante de H₂O dans une cellule.

La relation entre le flux entrant et la saturation moyenne dans la cellule est la fonction de flux effectif. Notons que l'approche GC est applicable tant que l'épaisseur des courants de gravité est inférieure à H_m , ce qui équivaut à une saturation moyenne \bar{S} relativement faible. Par conséquent, le cas test de montée du CO₂ dans une cellule nous donne seulement accès à la partie de la courbe de flux correspondant à de faibles saturations de CO₂. La partie de flux effectif correspondant à de fortes saturations de CO₂ est obtenue en appliquant la méthode GC à une configuration inverse qui considère la migration descendante de l'eau dans un réservoir initialement saturé en CO₂ (voir Figure 4.14).

La Figure 4.15 montre les courbes de flux effectifs calculés pour les trois cellules. On observe que le flux effectif dépend fortement de la géométrie de la cellule. Du fait de la

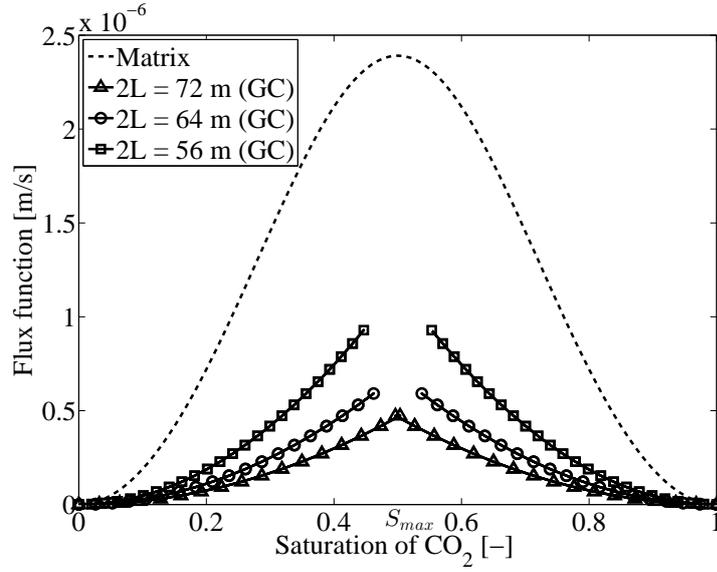


Figure 4.15 – Cas sans capillarité - Inclusions imperméables : flux gravitaire effectif en fonction de la saturation moyenne de CO_2 . La ligne discontinue présente le flux dans la matrice homogène. Les lignes continues avec symboles montrent le flux gravitaire mis à l'échelle et calculé par l'approche de courant de gravité, pour différentes valeurs de la longueur de l'inclusion.

symétrie du problème et du flux gravitaire dans la matrice, la partie de la courbe de flux effectif pour de faibles \bar{S} (à gauche) et celle pour de fortes \bar{S} (à droite) sont symétriques autour de la saturation S_{max}^m .

Considérons uniquement les courbes correspondant à la montée du CO_2 (à gauche). On constate que le flux effectif varie paraboliquement en fonction de la saturation moyenne, conformément à l'équation (4.51). On peut aussi trouver facilement que pour un flux donné, l'accumulation de CO_2 au dessous de l'inclusion et par conséquent la saturation moyenne augmentent en fonction de la longueur de l'inclusion. Ceci est confirmé par le fait que la courbe associée à la longueur $2L = 72m$ se situe au dessous de celles correspondant respectivement à $2L = 64m$ et à $2L = 56m$ respectivement. Ces courbes s'arrêtent aux points où la hauteur du courant de gravité dépasse l'écart vertical entre deux inclusions. La saturation moyenne associée à ces points varie entre 0,4 et 0,5.

4.4.2 Inclusions perméables - sans capillarité ($k^i \neq 0, p_c = 0$)

Le CO_2 peut entrer dans les inclusions et les deux phases sont présentes dans tout le domaine. La résolution du problème local devient donc plus compliquée, car il faut déterminer la carte de saturation dans toute la cellule pour un flux donné. Il n'y a pas de ségrégation nette entre les deux phases conduisant à la notion de courant de gravité. D'après la discussion du chapitre 3, on peut, dans une première approximation, supposer que la saturation de CO_2 obéit à la condition de continuité du flux total suivant la verticale uniquement. L'impact de la fluctuation de vitesse qui existe localement dans

la cellule sur cette condition de continuité (voir chapitre 3) est négligé. Puisque la capillarité est également omise, le profil de saturation du CO_2 peut être déterminé par la continuité du flux gravitaire uniquement.

Pour construire la courbe globale de flux effectif, il faut considérer les deux cas de condition initiale mentionnés dans le paragraphe 3.4.2.1 : le cas C.1 où aucun courant de gravité n'apparaît et le cas C.2 qui assure l'existence des courants de gravité à l'état permanent.

Faible saturation imposée (C.1) :

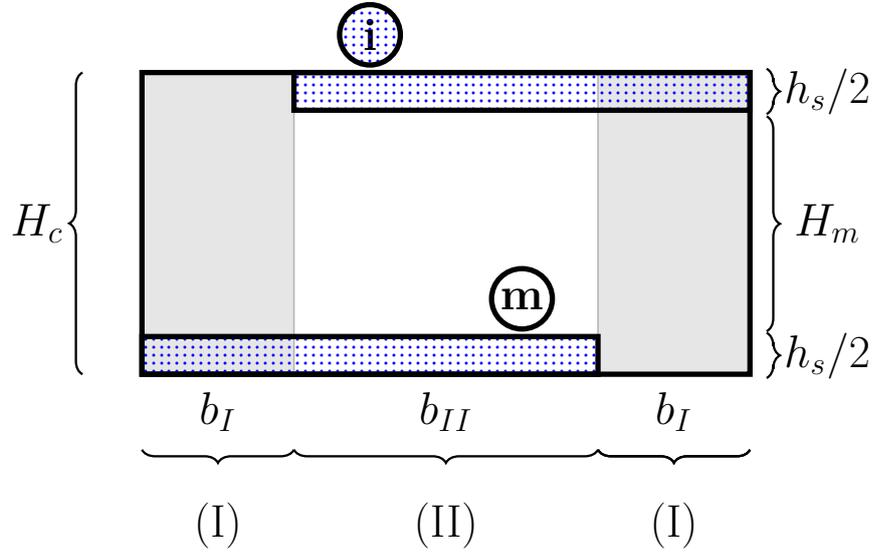


Figure 4.16 – Décomposition du domaine en multiples colonnes quasi-unidimensionnelles.

Dans ce cas, le domaine est divisé en deux types de colonnes quasi-unidimensionnelles : deux colonnes situées sur les deux côtés du domaine (zone I) et la colonne centrale (zone II) (voir Figure 4.16). Ces deux types se différencient par la fraction volumique des inclusions.

Définissons :

- V_a, Γ_a : le volume et la fraction volumique de la zone a ($a \in \{(I),(II)\}$) dans tout le domaine.
- V_a^b, Ω_a^b : le volume et la fraction volumique de la couche b dans la zone a ($a \in \{(I),(II)\}$, $b \in \{i,m\}$).

À partir de la géométrie du milieu représentée sur la Figure 4.16, on déduit :

$$\Omega_I^i = \frac{V_I^i}{V_I^m + V_I^i} = \frac{h_s}{H_c}, \quad \Omega_{II}^i = \frac{V_{II,2}}{V_{I,2} + V_{II,2}} = \frac{2h_s}{H_c}, \quad (4.53)$$

$$\Gamma_I = \frac{V_I}{V_I + V_{II}} = \frac{2b_I}{L_0}, \quad \Gamma_{II} = \frac{V_{II}}{V_I + V_{II}} = \frac{b_{II}}{L_0}. \quad (4.54)$$

Dans le cas où la saturation imposée est faible, $S_i \leq S_{l_1}^m$, la saturation dans la matrice S_+ et dans l'inclusion S_- sont constantes et respectent la continuité du flux gravitaire suivant les axes verticaux :

$$\bar{G} = G^m(S_+) = G^i(S_-) \Leftrightarrow k_+ \Lambda(S_+) = k_- \Lambda(S_-). \quad (4.55)$$

À partir de cette égalité, on peut déterminer la saturation moyenne dans chaque colonne, puis celle dans tout le domaine.

La saturation moyenne dans chaque zone est donnée par :

$$\text{Zone I} : \bar{S}_I = (1 - \Omega_I^i)S_+ + \Omega_I^i S_-, \quad (4.56)$$

$$\text{Zone II} : \bar{S}_{II} = (1 - 2\Omega_I^i)S_+ + 2\Omega_I^i S_-. \quad (4.57)$$

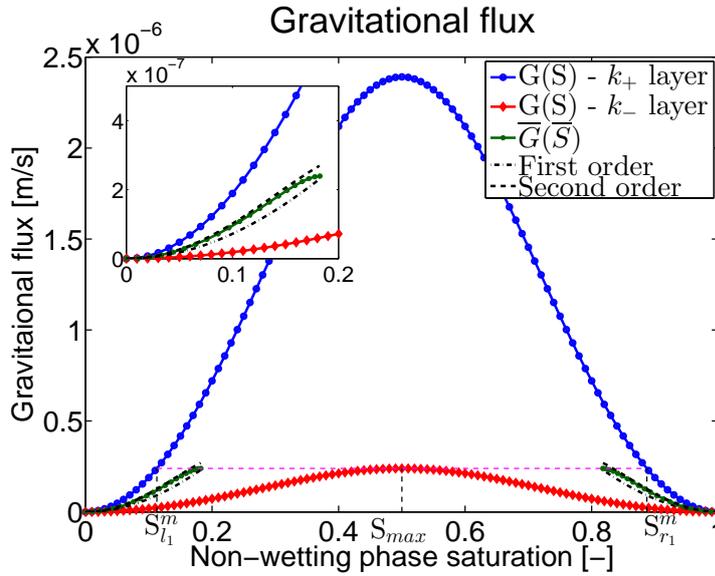


Figure 4.17 – Flux gravitaire dans la matrice (en bleu), dans l'inclusion (en rouge) et celui mis à l'échelle calculé numériquement (en vert) avec, ses approximations au premier et second ordre. La fenêtre rectangulaire en haut à gauche présente un zoom pour la partie de faible saturation.

La saturation moyenne dans la cellule s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \Gamma_I \bar{S}_I + \Gamma_{II} \bar{S}_{II} \\ &= \left[\Gamma_I (1 - \Omega_I^i) + \Gamma_{II} (1 - 2\Omega_I^i) \right] S_+ + \left[\Gamma_I \Omega_I^i + 2\Gamma_{II} \Omega_I^i \right] S_-. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Définissons par $w^m = \Gamma_I (1 - \Omega_I^i) + \Gamma_{II} (1 - 2\Omega_I^i)$ et par $w^i = \Gamma_I \Omega_I^i + 2\Gamma_{II} \Omega_I^i$ les fractions volumiques de la matrice et de l'inclusion dans la cellule. On obtient :

$$\bar{S} = w^m S_+ + w^i S_- \quad (4.59)$$

La fonction $\overline{G}(\overline{S})$ peut être calculée numériquement à partir des équations (4.55) et (4.59). Elle est également approximée par une expression analytique obtenue par un développement perturbatif de la fonction Λ en fonction de l'écart de perméabilité entre inclusion et matrice (appendice 4.8). Le flux gravitaire effectif numérique et ses approximations sont tracés sur la Figure 4.17. Comme on pouvait s'y attendre, l'approximation au deuxième ordre de l'écart de perméabilité donne une meilleure prédiction du flux effectif par rapport à celle au premier ordre, notamment pour les saturations faible devant $S_{l_1}^m$. Quand le flux effectif tend vers $G^m(S_{l_1}^m)$, les deux approximations échouent à capter la courbure du flux mis à l'échelle.

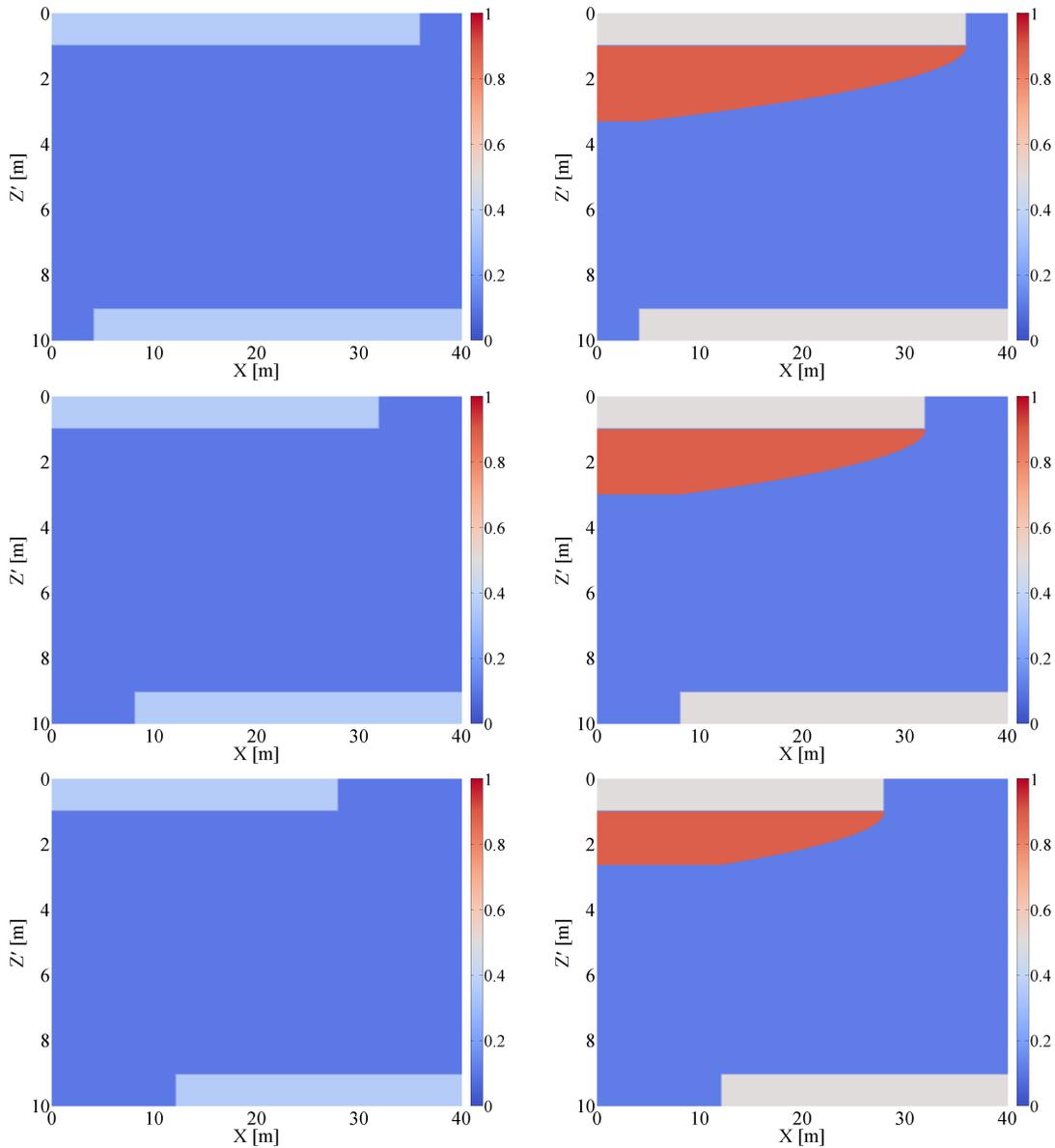


Figure 4.18 – Cas sans capillarité - Inclusions perméables : Reconstruction de la solution du problème local à petite échelle obtenue par l’approche de courant de gravité : $2L = 72$ [m] (haut), $2L = 64$ [m] (milieu) et $2L = 56$ [m] (bas) pour la saturation imposée $S_i = 0,05$ (à gauche) et $S_i = 0,10$ (à droite). Le rapport entre la perméabilité des inclusions et celle de la matrice est égal à $0,10$ qui conduit à $S_{l_1}^m = 0,1127$. Les traits en gris représentent les interfaces entre la matrice et les inclusions.

Forte saturation imposée (C.2) :

Au delà de la saturation critique $S_{l_1}^m$, un courant de gravité se forme sous l’inclusion. Comme nous l’avons discuté dans le chapitre précédent, la distribution dans la cellule est la suivante : la saturation est respectivement égale à $S_{l_1}^m$ dans la zone hors du courant de gravité de la matrice, à $S_{r_1}^m$ dans le courant de gravité, et à S_{max} dans l’inclusion.

À l'état permanent, la différence entre $G^m(S_i)$ et $G^i(S_{max})$ représente le flux d'alimentation q des courants de gravité. La formule (4.49) obtenue dans le cas d'une inclusion imperméable est réutilisable pour déterminer la forme des courants.

Le champ de saturation pour trois valeurs de largeurs des inclusions est reconstruit et présenté sur la Figure 4.18. Deux valeurs de saturation imposée S_i sont considérées : une saturation $S_i = 0,10$ qui est inférieure à $S_{l_1}^m$ et une autre valeur supérieure à $S_{l_1}^m$, $S_i = 0,12$. On note que dans le premier cas, $S_i = 0,10$, aucun courant de gravité n'apparaît. Les saturations dans la matrice et dans les inclusions, respectivement égales à S_i et S_{inc} , satisfont $G^i(S_{inc}) = G^m(S_i)$. Dans le deuxième cas, un courant de gravité se forme sous l'inclusion. La distribution de saturation a déjà été discutée précédemment.

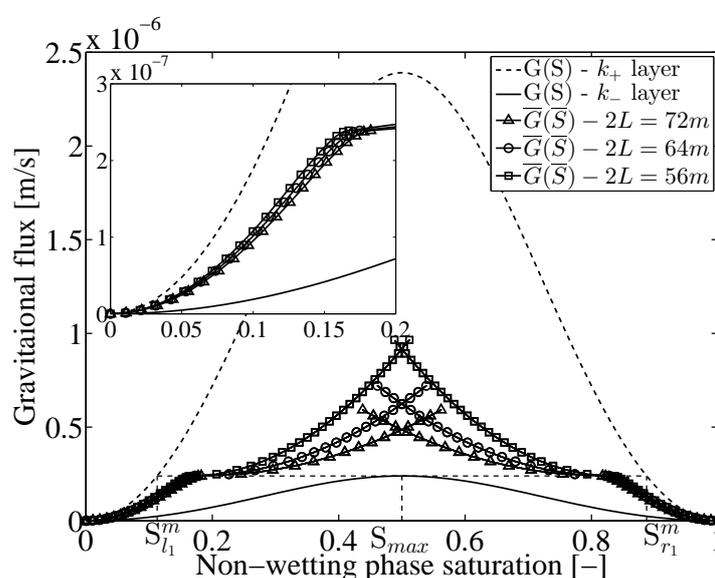


Figure 4.19 – Cas sans capillarité - Inclusions perméables : Flux gravitaire mis à l'échelle pour différentes géométries des inclusions perméables. La fenêtre rectangulaire en haut à gauche présente un zoom sur les faibles saturations.

La Figure 4.19 montre le flux gravitaire mis à l'échelle pour différents cas de géométrie avec la longueur de l'inclusion variant entre $2L = 56m$ et $2L = 72m$. Comme dans le cas des inclusions imperméables, chaque courbe consiste en deux branches séparées. La première branche à gauche (saturation proche de zéro) correspond à la montée du CO_2 dans un milieu saturé en eau. La deuxième, à droite (saturation proche de 1), correspond au cas de la migration descendante de l'eau dans un milieu initialement saturé en CO_2 . Dans ce dernier cas, si la saturation de l'eau imposée en haut est inférieure à $1 - S_{r_1}^m$, aucun courant de gravité de l'eau n'apparaît sur le bord supérieur de l'inclusion. Dans le cas contraire, le courant de gravité de l'eau se forme. Étant donné la symétrie du problème et du flux gravitaire dans l'inclusion et dans la matrice, les deux branches du flux effectif sont complètement symétriques autour du point $\bar{S} = 0.5$.

Considérons la première branche, c'est à dire la partie correspondante à la montée du

CO₂. Chaque branche comprend deux parties correspondant aux cas sans et avec courant de gravité. Il existe une déviation à la limite de ces deux parties dans chaque courbe. Il faut noter que l'écoulement darcéen et le courant de gravité sont deux physiques radicalement différents qui superposent et peuvent exercer une profonde influence l'un sur l'autre. Néanmoins, dans ce manuscrit, l'interaction entre ces deux phénomènes sont par simplicité négligée.

4.4.3 Inclusions imperméables - avec capillarité ($\mathbf{k}^i = \mathbf{0}$, $\mathbf{p}_c \neq \mathbf{0}$)

On considère maintenant le cas où la capillarité est prise en compte. Tout d'abord, les inclusions sont supposées être imperméables. Un modèle de courant de gravité dans un système mono-strate alimenté par un flux entrant localisé en $x = 0$ a été présenté par Golding *et al.* (2011). Les auteurs négligent l'effet de la cheminée de CO₂ au voisinage de l'extrémité de l'inclusion qui relie deux courants de gravité consécutifs, et le flux entrant est supposé être ponctuel, situé à une distance l [m] du centre de l'inclusion. Nous présentons ci-dessous un nouveau modèle de courant de gravité qui se distingue de celui de Golding *et al.* (2011) par la localisation du flux entrant. En utilisant les notions de variables adimensionnées ainsi que les quantités caractéristiques définies dans le paragraphe 3.4.3, l'équation adimensionnée des courants de gravité s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[\hat{h} \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{x}} \mathcal{F}(\hat{h}B) \right] = -\delta(\hat{x} - \hat{l}) + \delta(\hat{x} - 1), \quad (4.60)$$

où $B = \frac{\Delta \rho g H}{P_e} = \frac{H}{h_e}$ est le nombre de Bond et $\delta(x)$ est la fonction de Dirac. Le flux $\mathcal{F}(\hat{h}B)$ prend en compte l'effet de la capillarité :

$$\mathcal{F}(\hat{h}B) = \frac{1}{\lambda \hat{h}B} \int_0^{S_0(\hat{h}B)} S^2 (1 - S)^{-\frac{\lambda+1}{\lambda}} dS, \quad (4.61)$$

avec

$$S_0(\hat{h}B) = 1 - (1 + \hat{h}B)^{-\lambda}. \quad (4.62)$$

Une expression analytique de l'intégration dans la fonction du flux \mathcal{F} est donnée par Golding *et al.* (2011) pour λ quelconque :

$$\int_0^{s_0} s^2 (1 - s)^{-\frac{\lambda+1}{\lambda}} dS = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{3s_0^2 - 2s_0}{(1-s_0)^2} - 2\ln(1 - s_0) \right] & (\lambda = 0.5) \\ \left[\frac{2s_0 - s_0^2}{1-s_0} + 2\ln(1 - s_0) \right] & (\lambda = 1) \\ \lambda \left[\frac{(1-s_0)^{-1/\lambda}}{1-2\lambda} \left(s_0^2 + \frac{2\lambda(s_0-\lambda)}{\lambda-1} \right) + \frac{2\lambda^2}{(\lambda-1)(1-2\lambda)} \right] & (\lambda \neq 0.5, 1) \end{cases} \quad (4.63)$$

On considère le cas $\lambda = 2$, ce qui est souvent utilisé dans la littérature (Mouche *et al.*, 2010; Mikelic *et al.*, 2002; Van Duijn *et al.*, 2007). Le flux \mathcal{F} s'écrit alors :

$$\mathcal{F}(\hat{h}B) = \frac{1}{\hat{h}B} \left[\frac{(1 - S_0(\hat{h}B))^{-1/2}}{-3} \left(S_0(\hat{h}B)^2 + 4S_0(\hat{h}B) - 8 \right) \cdot -\frac{8}{3} \right] \quad (4.64)$$

À partir de l'expression de $S_0(\hat{h}B)$ donnée par les équations (4.62) et (4.64), la fonction \mathcal{F} devient :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\hat{h}B) &= \frac{1}{\hat{h}B} \left[\frac{(1 - S_0(\hat{h}B))^{-1/2}}{-3} (S_0(\hat{h}B)^2 + 4S_0(\hat{h}B) - 8) - \frac{8}{3} \right] \\ &= \frac{1}{3\hat{h}B} \left\{ (1 + \hat{h}B) \left[-(1 + \hat{h}B)^{-4} + 6(1 + \hat{h}B)^{-2} + 3 \right] - 8 \right\} \\ &= \frac{1}{\hat{h}B} \left\{ \hat{h}B + 2(1 + \hat{h}B)^{-1} - \frac{(1 + \hat{h}B)^{-3}}{3} - \frac{5}{3} \right\}.\end{aligned}\quad (4.65)$$

En intégrant l'équation (4.60) de 0 à x deux fois consécutivement, nous obtenons la solution de la hauteur du courant de gravité qui satisfait :

- Si $\hat{x} \leq \hat{l}$: $\Rightarrow \hat{h} = \hat{h}_0$, où $\hat{h}_0 = \left[\hat{h} \right]_{[x=0]}$
- Si $\hat{x} > \hat{l}$:

$$\Rightarrow \left[\frac{\hat{h}^2}{2} - \frac{5\hat{h}}{3B} + \frac{2\ln(1 + \hat{h}B)}{B^2} + \frac{1}{6B^2(1 + \hat{h}B)^2} \right] - \left[\frac{\hat{h}^2}{2} - \frac{5\hat{h}}{3B} + \frac{2\ln(1 + \hat{h}B)}{B^2} + \frac{1}{6B^2(1 + \hat{h}B)^2} \right]_{[x=0]} = -(\hat{x} - \hat{l}) \quad (4.66)$$

La condition aux limites $\hat{h} = 0$ en $\hat{x} = 1$ donne la solution de \hat{h}_0 :

$$\frac{\hat{h}_0^2}{2} - \frac{5\hat{h}_0}{3B} + \frac{2\ln(1 + \hat{h}_0B)}{B^2} + \frac{1}{6B^2(1 + \hat{h}_0B)^2} - \frac{1}{6B^2} = 1 - \hat{l} \quad (4.67)$$

Donc, la solution de la hauteur des courants de gravité est :

$$\begin{cases} \hat{h} = \hat{h}_0 & \text{si } 0 < \hat{x} \leq \hat{l} \\ \frac{\hat{h}^2}{2} - \frac{5\hat{h}}{3B} + \frac{2\ln(1 + \hat{h}B)}{B^2} + \frac{1}{6B^2(1 + \hat{h}B)^2} = 1 + \frac{1}{6B^2} - \hat{x} & \text{si } \hat{l} < \hat{x} \leq 1 \end{cases} \quad (4.68)$$

Le volume total du CO_2 dans le courant de gravité est donné par :

$$V_{gc} = \int_0^1 \hat{h}^*(\hat{x}, \hat{z}) d\hat{x}^*. \quad (4.69)$$

En notant que

$$S(\hat{h}B, \hat{z}) = 1 - [1 + (\hat{h} - \hat{z})B]^{-\lambda}, \quad (4.70)$$

l'équation (4.69) se réécrit :

$$\begin{aligned}V_{CO_2} &= \int_0^1 \int_0^{\hat{h}} S(\hat{h}B, \hat{z}) d\hat{z} d\hat{x} \\ &= \int_0^1 \int_0^{\hat{h}} \left(1 - [1 + (\hat{h} - \hat{z})B]^{-\lambda} \right) d\hat{z} d\hat{x} \\ &= \int_0^1 \left(\hat{h} + \frac{1 - (1 + \hat{h}B)^{-\lambda+1}}{(-\lambda + 1)B} \right) d\hat{x}.\end{aligned}\quad (4.71)$$

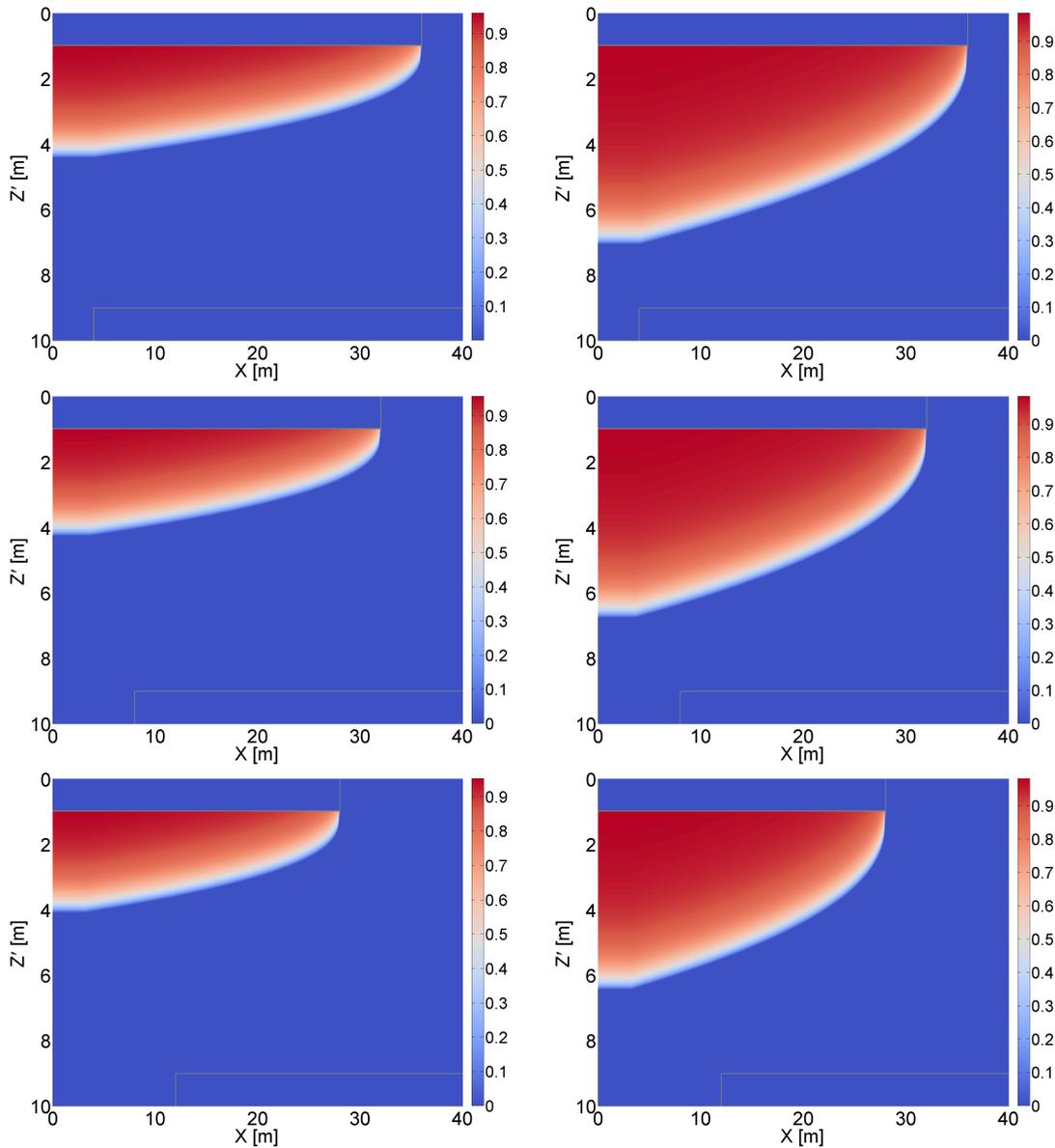


Figure 4.20 – Cas avec capillarité - Inclusions imperméables : reconstruction de la solution du problème local à petite échelle obtenue par l'approche de courant de gravité : $2L = 72$ [m] (haut), $2L = 64$ [m] (milieu) et $2L = 56$ [m] (bas) pour la saturation imposée $S_i = 0,05$ (à gauche) et $S_i = 0,10$ (à droite) . Les traits en gris représentent les interfaces entre la matrice et les inclusions.

La saturation effective est calculée en divisant le volume du CO₂ dans l'équation (4.71) par le volume effectif V_e d'une cellule.

La Figure 4.20, qui présente la carte de saturation dans la cellule, montre clairement la variation de saturation dans les courants de gravité induite par la diffusion capillaire. La zone hors du courant, dans la matrice, reste saturée en eau. En comparant avec les profils de saturation correspondant au cas sans capillarité (Figure 4.12), on voit que la

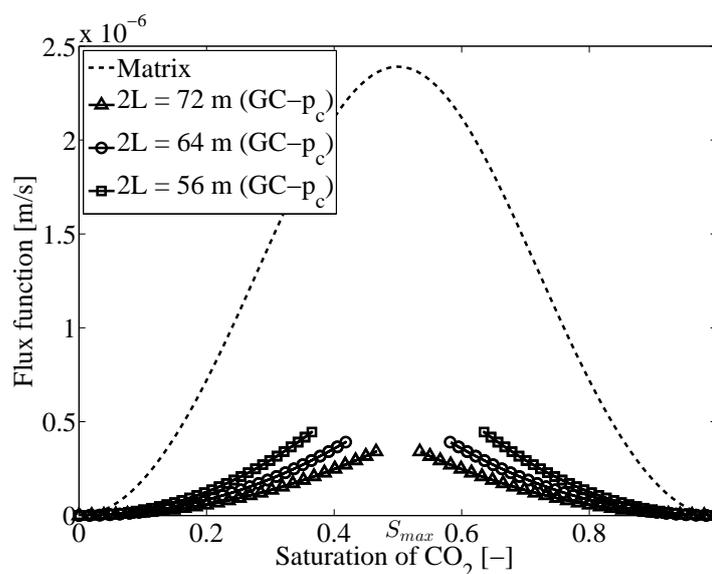


Figure 4.21 – Cas avec capillarité - Inclusions imperméables : flux gravitaire de la matrice homogène (lignes discontinues) et flux gravitaires mis à l'échelle calculés par l'approche des courants de gravité pour différentes valeurs de la longueur de l'inclusion (lignes continues avec symboles).

diffusion capillaire augmente la hauteur du courant de gravité.

La Figure 4.21 montre la courbe du flux effectif pour différentes géométries. Comme dans le cas sans capillarité, une variation parabolique du flux effectif en fonction de la saturation moyenne est constaté. On trouve aussi facilement que pour un flux donné, l'accumulation de CO_2 en dessous de l'inclusion, et donc la saturation moyenne, augmentent en fonction de la longueur de l'inclusion. En comparant les courbes de flux effectif avec celles obtenues dans le cas sans capillarité et avec la même géométrie, Figure 4.15, on observe que pour une saturation donnée, la valeur du flux effectif dans ce cas est plus faible. Cela s'explique par la contribution négative du flux capillaire dans le flux effectif.

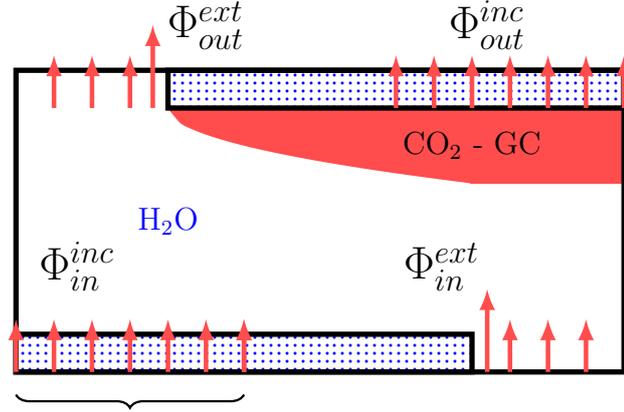
4.4.4 Inclusions perméables - avec capillarité ($\mathbf{k}^i \neq \mathbf{0}$, $\mathbf{p}_c \neq \mathbf{0}$)

Considérons cette fois-ci des inclusions semi-perméables et avec capillarité. Contrairement au cas des inclusions imperméables, le CO_2 peut pénétrer partiellement à travers l'inclusion, là où la barrière capillaire est surmontée (Figure 4.22).

L'équation du courant de gravité s'écrit donc :

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[\hat{h} \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{x}} \mathcal{F}(\hat{h}B) \right] = \hat{\Phi}_{out} - \hat{\Phi}_{in}, \quad (4.72)$$

où $\hat{\Phi}_{in}$ et $\hat{\Phi}_{out}$ sont respectivement les flux adimensionnés entrant et sortant du courant de gravité. Chaque quantité $\hat{\Phi}_{in/out}$ doit être décomposée en deux termes : un flux



Zone de passage à travers l'inclusion

Figure 4.22 – Schéma de la montée du CO_2 dans le cas avec capillarité et inclusion perméable. Les flux distribués sont représentés par de petites flèches, les flux ponctuels par des flèches plus grandes.

$\hat{\Phi}_{in/out}^{inc}$ distribué le long de l'inclusion et un flux ponctuel $\hat{\Phi}_{in/out}^{ext}$ localisé à l'extrémité de l'inclusion. Grâce à la symétrie et à la périodicité de la cellule le flux ponctuel entrant $\hat{\Phi}_{in}^{ext}$ est, à l'état permanent, le même que le flux sortant $\hat{\Phi}_{out}^{ext}$. Bien que les intégrales sur toute la largeur de la cellule du flux entrant distribué et du flux sortant s'équilibrent, cette égalité suivant un axe vertical n'est pas tout à fait correcte. Néanmoins, en première approximation, on supposera que la différence selon l'axe Z entre $\hat{\Phi}_{in}^{inc}$ et $\hat{\Phi}_{out}^{inc}$ disparaît. Par conséquent, ce qui reste dans le membre droit de l'équation (4.72) ne représente que des termes ponctuels $\hat{\Phi}_{in/out}^{ext}$. Ces derniers peuvent être représentés par deux fonctions de Dirac $\delta(\hat{x} - \hat{l})$ et $\delta(\hat{x} - 1)$. On retrouve ainsi l'équation du courant de gravité sous l'inclusion imperméable dont la solution est donnée par l'équation (4.68) :

$$\frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[\hat{h} \frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{x}} \mathcal{F}(\hat{h}B) \right] = -\bar{q} \delta(\hat{x} - \hat{l}) + \bar{q} \delta(\hat{x} - 1), \quad (4.73)$$

où \bar{q} est la fraction entre le flux ponctuel $\hat{\Phi}_{out}^{inc}$ et le flux total \hat{q} .

$$\bar{q} = \frac{\hat{\Phi}_{out}^{ext}}{\hat{q}} = \frac{\hat{q} - \hat{\Phi}_{out}^{inc}}{\hat{q}}. \quad (4.74)$$

Comme le terme \bar{q} dépend du flux $\hat{\Phi}_{out}^{inc}$, et par conséquent de la hauteur du courant \hat{h} , l'équation (4.73) est résolue de façon itérative tel que décrit dans ce qui suit. On commence en choisissant $\bar{q} = 1$, ce qui signifie que le CO_2 n'entre pas du tout dans l'inclusion. Grâce à l'équation (4.68), on peut déterminer la hauteur du courant de gravité, et calculer le profil de saturation du CO_2 le long de l'interface entre la matrice et l'inclusion via l'équation (4.62). À partir de ce résultat, on détermine le flux sortant à travers l'inclusion $\hat{\Phi}_{out}^{inc}$ via la continuité du flux gravitaire comme discuté dans le chapitre 3. Le flux sortant total $\hat{\Phi}_{out}^{inc} + \hat{\Phi}_{out}^{ext}$ est ensuite recalculé. Le terme \bar{q} est ensuite ajusté en se basant sur la différence entre le flux sortant et le flux imposé q . Ce terme sera utilisé dans le calcul du courant de gravité de l'étape suivante. Ce processus s'arrête dès que le

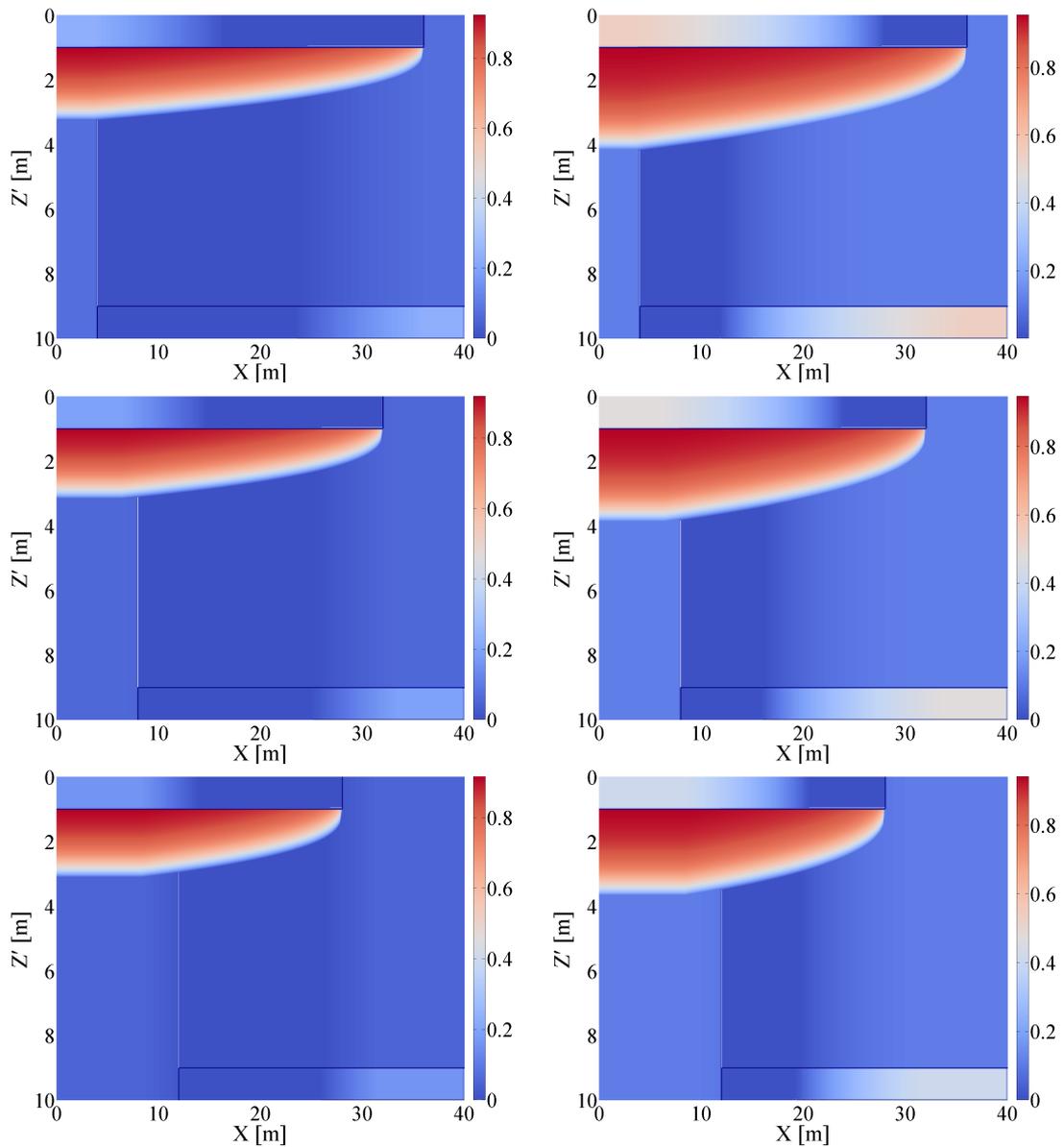


Figure 4.23 – Cas avec capillarité - Inclusions perméables : reconstruction de la solution du problème local à petite échelle obtenue par l’approche de courant de gravité : $2L = 72$ [m] (haut), $2L = 64$ [m] (milieu) et $2L = 56$ [m] (bas) pour la saturation imposée $S_i = 0,05$ (à gauche) et $S_i = 0,10$ (à droite). Les inclusions sont délimitées par les traits continus.

flux sortant et le flux imposé s’équilibrent.

La Figure 4.23 montre la carte de saturation dans la cellule. En comparant avec les profils de saturation correspondants dans le cas sans capillarité (Figure 4.18), on trouve que la barrière capillaire engendre une accumulation sous les inclusions même avec de faibles saturations imposées, $S_i = 0,05$ par exemple. Le CO_2 ne peut que pénétrer partiellement à travers l’interface. Il y a donc certaines zones dans le domaine qui restent toujours saturées en saumure.

L'algorithme pour déterminer la distribution de saturation dans la cellule à l'état permanent présenté ci-dessus est répété pour différentes valeurs de S_i . Les résultats sont utilisés pour construire la courbe du flux effectif numérique. La Figure 4.19 montre le flux total mis à l'échelle en fonction de la saturation moyenne dans la cellule, pour trois géométries différentes. Le rapport entre la perméabilité des inclusions et celle de la matrice est égal à 0,10.

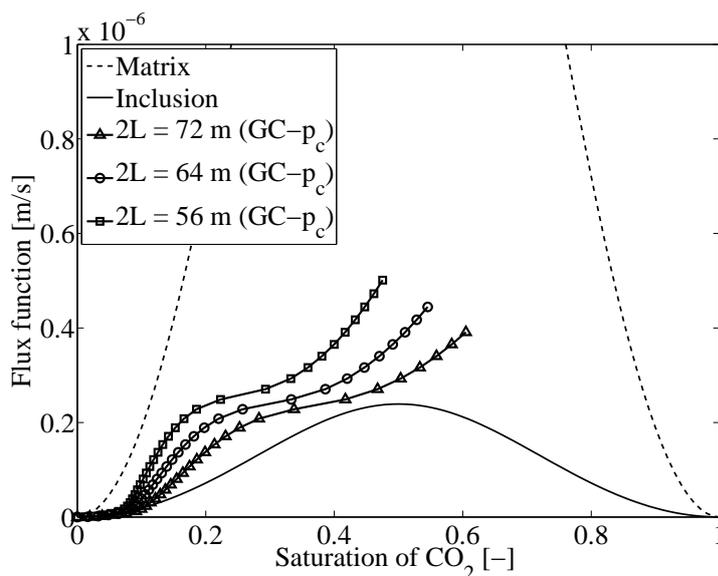


Figure 4.24 – Cas avec capillarité - Inclusions perméables : Flux total mis à l'échelle calculé numériquement pour des inclusions semi-perméables de $2L = 56$ [m], $2L = 64$ [m] et $2L = 72$ [m] de longueur.

4.5 Validation des modèles et discussion

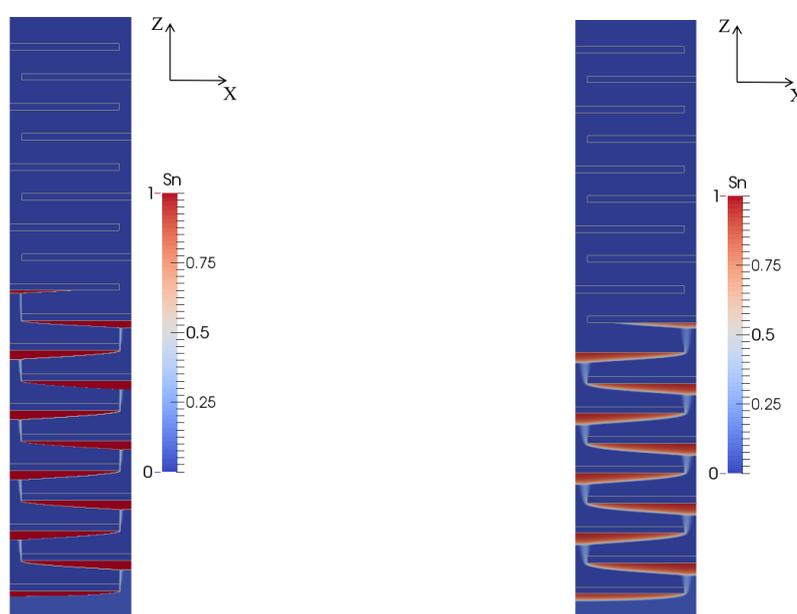
Pour valider les modèles développés pour chacun des cas présentés précédemment, plusieurs cas tests numériques simulant la montée gravitaire du CO_2 dans une colonne 2D périodique constituée d'inclusions décalées ont été effectués. La colonne est initialement saturée en saumure. La saturation de CO_2 est fixée en bas de la colonne tandis que tous les autres bords sont complètement imperméables pour les deux fluides. La saumure qui descend laisse donc la place au CO_2 qui remonte. Tous les simulations sont réalisées à l'aide du code DuMu^x (Flemisch *et al.*, 2011). Le domaine a une largeur de 40 m et une hauteur de 200 m. Rappelons que la hauteur d'une cellule périodique est de 20 m et le petit paramètre de développement ε est donc égal à 0,10. Le maillage est uniforme et constitué de 160×800 mailles carrées suivant les axes x et z . La taille d'une maille est donc de $0,25$ [m] \times $0,25$ [m]. La saturation de CO_2 imposée en bas de la colonne peut croître de 0 à 1.

Nous examinons seulement les cellules à l'arrière du front et à un temps où la distribution du CO_2 est à l'état permanent. Les courbes de flux gravitaire effectif calculées

numériquement sont déduites à partir des résultats des simulations dans ces cellules et sont comparées aux courbes analytiques obtenues à l'aide de l'approche des courants de gravité. La validation des modèles est d'abord effectuée dans le cas d'inclusions imperméables, puis dans le cas d'inclusions perméables.

• **Inclusions imperméables :**

La Figure 4.25 montre la carte de saturation du CO_2 au moment où cette phase a parcouru environ la moitié de la colonne. En présence de capillarité, la saturation dans les courants de gravité et la vitesse de montée verticale macroscopique du CO_2 sont plus faibles. En revanche, à cause de la diffusion capillaire, les courants sur la Figure 4.25b sont plus épais que ceux sur la Figure 4.25a.



(a) $p_c = 0, t = 1,4 \times 10^8$ s.

(b) $p_c \neq 0, t = 1,4 \times 10^8$ s.

Figure 4.25 – Inclusions imperméables : évolution du CO_2 dans la colonne bi-dimensionnelle pour une saturation imposée $S_i = 0,05$ dans les cas sans capillarité (à gauche) et avec capillarité (à droite). Les interfaces entre la matrice et les inclusions sont représentés par les traits continus.

La Figure 4.26 présente une comparaison entre le flux effectif numérique obtenu avec DuMu^x et le flux analytique calculé à l'aide de l'approche des courants de gravité (GC) pour les cas sans et avec capillarité. Les courbes numériques et analytiques montrent un bon accord pour les saturations faibles (inférieures à 0,30) et commencent à diverger pour les saturations plus élevées. Comme cela a été discuté auparavant, l'approximation de Boussinesq, et par conséquent l'approche GC, se limite aux courants de faible épaisseur et donc aux faibles saturations en CO_2 .

La courbe en pointillés sur la Figure 4.26 montre le résultat obtenu avec une approche phénoménologique. Pour cela, on suppose que les perméabilités relatives du CO_2 et de

l'eau à petite échelle, dans la matrice et dans l'inclusion, restent inchangées pour le milieu équivalent à grande échelle. Par conséquent, la courbe de flux équivalent peut être calée par rapport à la courbe numérique en calibrant uniquement la perméabilité absolue équivalente k_{fit} . La relation est donc :

$$\bar{\Phi} = k_{fit} \times \Lambda(\bar{S}). \quad (4.75)$$

Quand la perméabilité absolue de la matrice vaut à $3 \times 10^{-12} \text{ m}^2$, la valeur de k_{fit} obtenue est respectivement de $1,95 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ pour le cas sans capillarité et de $1,8 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ lorsque la capillarité est prise en compte.

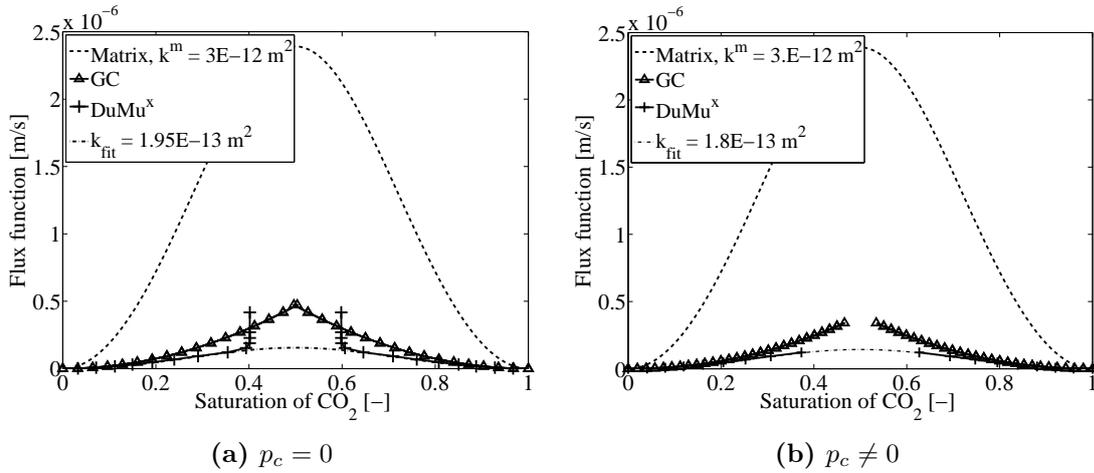


Figure 4.26 – Inclusions imperméables : flux total effectif pour le cas sans capillarité (à gauche) et avec capillarité (à droite). La longueur des inclusions est fixée à $2L = 72 \text{ m}$.

• Inclusions perméables :

Le rapport des perméabilités de l'inclusion sur celle de la matrice est égal à 1/10. La Figure 4.27 montre la carte de saturation du CO_2 au temps $t = 1,0 \times 10^8$ pour deux valeurs de saturation imposée, $S_i = 0,05$ et $S_i = 0,13$.

Dans le cas $S_i = 0,05$ et sans capillarité, aucun courant de gravité n'apparaît sous les inclusions semi-perméables (Figure 4.27a). On trouve facilement que dans ce cas la saturation dans la matrice et celle dans les inclusions sont constantes.

Au contraire, quand la capillarité est prise en compte, on observe la formation des courants de gravité sous les inclusions, ce qui est dû à la barrière capillaire (Figure 4.27b). On voit bien que le CO_2 ne peut que pénétrer partiellement à travers les strates, où le courant de gravité est suffisamment épais. On peut constater également que la capillarité ralentit considérablement la montée verticale macroscopique de CO_2 .

Pour les saturations plus fortes, $S_i = 0,13$ par exemple, la stratification de CO_2 est observée dans les deux cas, sans ou avec capillarité. Pour le cas sans capillarité, ce phénomène est expliqué par le fait que le flux gravitaire correspondant à S_i dépasse le flux

convectif maximal dans les inclusions (section 4.2). On note que au temps $t = 1,0 \times 10^8$ s, les courants de gravité sous les strates dans les premières cellules à partir du bas de la colonne sont quasiment stationnaires (voir Figure 4.27c). La solution dans ces cellules est donc utilisée pour le calcul du flux effectif numérique.

La Figure 4.27d montre la carte de la saturation quand la capillarité est prise en compte. On observe que dans les cellules en bas, la hauteur de courant de gravité dépasse la distance verticale H_m entre deux inclusions consécutives car l'effet de capillarité est important. Étant donné l'importance du reflux de CO_2 , la théorie des courants de gravité n'est plus valable dans ce cas.

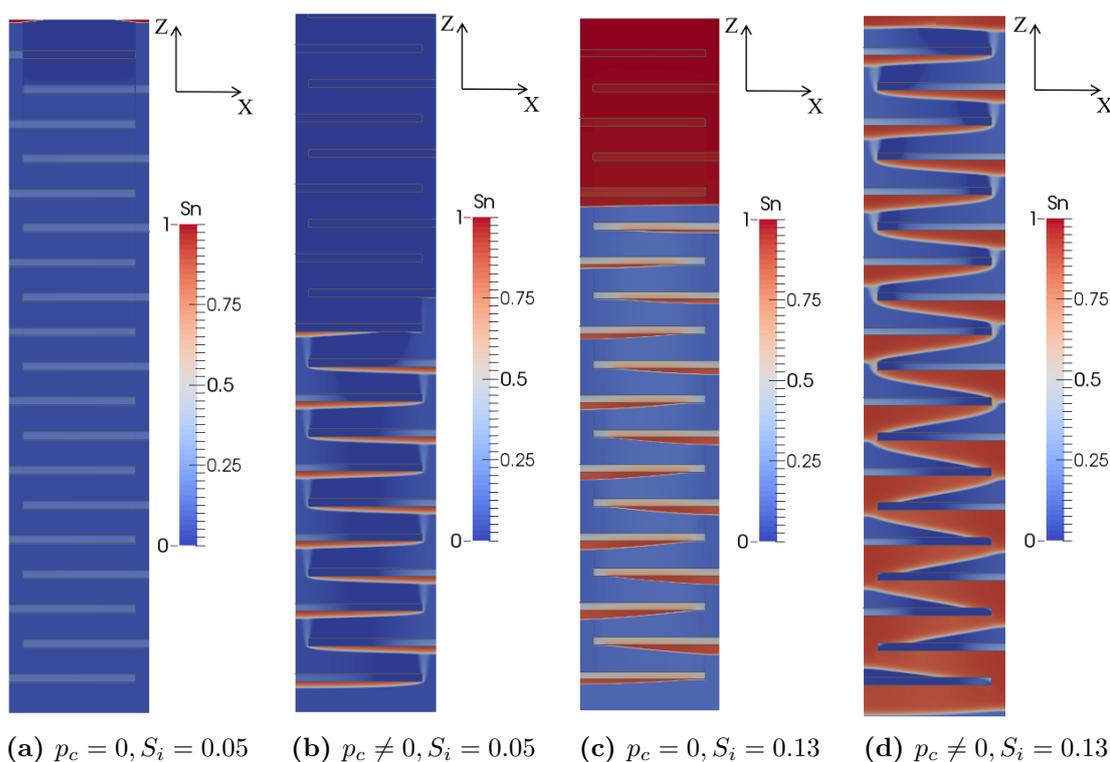


Figure 4.27 – Inclusions perméables : carte de saturation du CO_2 dans la colonne bi-dimensionnelle au temps $t = 1,0 \times 10^8$ s pour les cas sans capillarité (a,c) et avec capillarité (b,d).

La comparaison entre le flux effectif numérique obtenu avec DuMu^x et celui de l'approche GC est présentée sur la Figure 4.28. Un assez bon accord entre ces courbes est observé dans les deux cas, sans (Figure 4.28a) ou avec capillarité (Figure 4.28b).

Quand la capillarité est négligée, la courbe numérique de flux effectif est constituée de deux parties différentes qui se distinguent par la présence ou non de courants de gravité. La première partie, qui concorde parfaitement avec la courbe analytique, présente une variation non-linéaire du flux effectif quand la saturation imposée est faible, $S_i \leq S_{l_1}^m$. En ce qui concerne la deuxième partie, quand $S_i > S_{l_1}^m$, les résultats numériques montrent

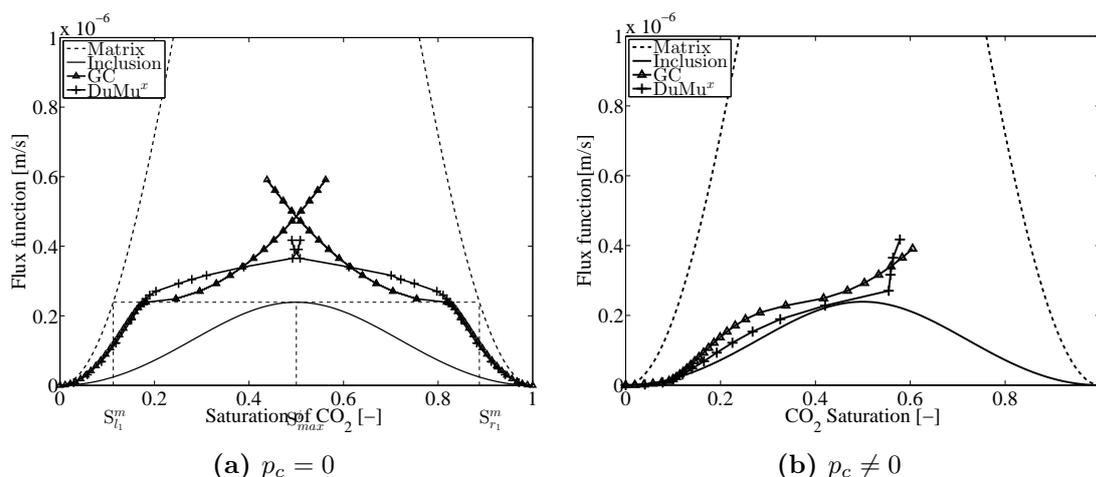


Figure 4.28 – Inclusions perméables : flux total effectif pour le cas sans capillarité (à gauche) et avec capillarité (à droite). La longueur des inclusions est fixée à $2L = 72m$.

une variation quasiment linéaire tandis que le flux effectif analytique varie paraboliquement comme discuté dans la section 4.4. Nous pensons que la différence entre ces deux courbes souligne l'importance de la prise en compte de la fluctuation de vitesse lors de la résolution du problème local à l'aide de l'approche GC. Ce point est discuté dans le chapitre 3 sur l'écoulement à travers et autour d'une strate semi-perméable.

Lorsque la capillarité est prise en compte, les courbes analytique et numérique sont proches de celle représentant le flux effectif dans l'inclusion. On observe que en restant dans la limite gravité dominante, la différence entre les courbes avec et sans capillarité n'est pas importante. La capillarité conduit à augmenter la saturation dans la cellule, et donc fait déplacer la courbe du flux effectif vers la droite sur l'axe des saturations. Cette courbe effective est comparable à celle du cas "balance" de l'écoulement unidimensionnel présentée dans le chapitre 2.

4.6 Mise à l'échelle de la perméabilité relative

Nous abordons ici le problème de la mise à l'échelle des perméabilités relatives de la saumure et du CO_2 .

4.6.1 Méthodologie

4.6.1.1 Méthode de l'écoulement monophasique (SPA)

Nous étudions ici comment l'approche SPA, qui signifie en anglais "**S**ingle-**P**hase **A**veraging", peut être utilisée pour la mise à l'échelle dans le cas où la gravité est dominante. Seul le cas sans capillarité est examiné. Cette méthode permet de déterminer la perméabilité relative mise à l'échelle en ramenant le problème de l'écoulement diphasique à celui de deux écoulement monophasiques indépendants (Dykaar et Kitanidis (1992)). La mé-

thode SPA est bien décrite dans le cas où la capillarité est dominante (Ataie-Ashtiani *et al.*, 2001; Eichel *et al.*, 2005; Braun *et al.*, 2005). Selon ces derniers auteurs, la distribution locale de saturation et la perméabilité apparente sont obtenues à partir du modèle de percolation. À notre connaissance, aucun travail n'a été consacré jusqu'à présent à la mise à l'échelle de la perméabilité relative lorsque l'effet de gravité est dominant.

Nous présentons dans ce qui suit une approche semi-analytique pour calculer par la méthode SPA la perméabilité relative mise à l'échelle du fluide α quand il est macroscopiquement connecté. Pour cela, on suppose que la migration du fluide α n'est pas impactée par celle du fluide β ($\alpha, \beta \in \{H_2O, CO_2\}$). Autrement dit, le squelette solide et le fluide β créent une nouvelle matrice par laquelle le fluide α peut s'écouler. Ce comportement physique est illustré sur la Figure 4.29.

Lorsque la saumure est dominante et connexe dans toute la colonne, le CO_2 est minoritaire et forme des courants de gravité qui s'écoulent vers le haut (Figure 4.29a). La saumure circule vers le bas dans un milieu délimité par les courants de gravité du CO_2 et par les inclusions. Inversement, quand le CO_2 est majoritaire, la saumure forme des courants de gravité qui s'écoulent vers le bas et le CO_2 circule vers le haut dans un milieu délimité par les courants de gravité de la saumure et les inclusions. On suppose, dans cette description, que les inclusions sont imperméables et que la ségrégation des phases est complète. Lorsque les inclusions sont semi-perméables, la méthode SPA est toujours applicable comme nous le verrons plus loin.

La procédure de notre approche est décrite ci-après, procédure que l'on peut également trouver dans Durlofsky (1991) et Wen *et al.* (2003). Pour un flux entrant donné, la distribution de saturation est déterminée analytiquement à l'aide de l'approche des courants de gravité. Une fois la carte de saturation connue, la saturation moyenne \bar{S}_α et la distribution de perméabilité apparente locale sont calculées. Nous résolvons ensuite l'équation de pression de la saumure ou du CO_2 numériquement, en appliquant un gradient de pression entre le haut et le bas de la colonne, *i.e.* on résout l'équation de Darcy dans un milieu matrice délimité par les inclusions et les courants de gravité. Le champ de vitesse est ensuite déduit à partir du champ de pression calculé. Finalement, à partir du débit (*i.e.* la vitesse intégrée à travers une section transverse à l'écoulement vertical), on en déduit la perméabilité effective du milieu homogène équivalent.

Chaque valeur de perméabilité effective calculée représente un point de la courbe de perméabilité relative effective $\bar{k}_{r_w}(\bar{S})$. Nous répétons la procédure ci-dessus avec des valeurs du flux entrant q croissantes jusqu'à la valeur à laquelle l'épaisseur du courant de gravité dépasse l'intervalle vertical entre deux inclusions consécutives. Notons que le flux q ne peut pas non plus dépasser le flux gravitaire maximal mentionné dans le paragraphe 4.2. Autrement dit, cette procédure ne nous permet de construire qu'une partie de la courbe de perméabilité relative mise à l'échelle.

Afin d'obtenir la deuxième composante diagonale du tenseur de perméabilité relative, il faudrait considérer une autre configuration de la simulation du flux en changeant la direction du gradient de pression imposé. Néanmoins, dans notre application, on ne s'intéresse qu'à l'écoulement vertical à grand échelle, donc à la composante verticale du

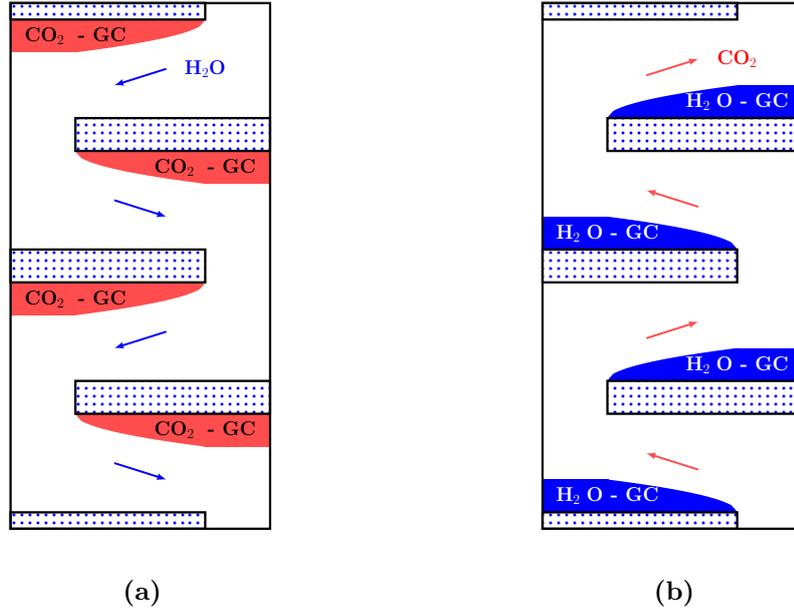


Figure 4.29 – Cas sans capillarité : sketch des courants de gravité dans une colonne bidimensionnelle pour la montée du CO_2 (a) et pour la migration descendante de la saumure (b).

tenseur $\bar{k}_{rw,ZZ}$.

4.6.1.2 Méthode basée sur la simulation de l'écoulement diphasique (NURP)

Nous avons développé une méthode *a posteriori* basée sur la simulation de l'écoulement diphasique avec DuMu^x et son post traitement. Dans ce qui suit, cette méthode est appelée, par commodité, la méthode **NURP**, d'après le mot anglais "Numerical Upscaled Relative Permeability". À partir de l'équation (4.18), nous supposons que l'on peut réécrire la vitesse moyenne dans la cellule sous la forme :

$$\langle \mathbf{q}_{\alpha,0} \rangle = -\frac{\bar{k}_{abs}}{\mu_{\alpha}} \bar{k}_{r\alpha}(S_0) (\nabla_{\mathbf{x}} p_{\alpha,0} + \rho_{\alpha} g \mathbf{e}_3), \quad (4.76)$$

où :

- \bar{k}_{abs} désigne la perméabilité effective du milieu. Elle peut se calculer à l'aide de l'approche SPA dans le cas où le flux de CO_2 q est nul, c'est à dire sans courant de gravité.
- $\bar{k}_{r\alpha}(S_0)$ est la perméabilité relative mise à l'échelle de la phase α .

En réécrivant l'équation (4.18) sous la forme (4.76), on suppose implicitement que le terme de correction de la vitesse lié à la pression à l'ordre 1 de l'équation (4.18) peut se

réécrire de façon classique comme un terme correctif à l'ordre 0 et donc conduire à une perméabilité équivalente.

La procédure pour déterminer $\bar{k}_{r_\alpha}(S_0)$ à partir des simulations d'écoulement diphasique se décompose en quatre étapes :

1. Choix de la cellule dans laquelle l'écoulement est permanent.
2. Calcul numérique de la vitesse moyenne $\langle \mathbf{q}_{\alpha,0} \rangle$ dans la cellule.
3. Calcul numérique du gradient de pression moyen $\partial p_{\alpha,0}/\partial X_3$ dans la cellule.
4. Calcul de $\bar{k}_{r_\alpha}(S_0)$ à partir de l'équation (4.76).

L'application de cette procédure pour différentes valeurs de saturation imposée $S_{i,\alpha}$ conduit à la courbe de perméabilité effective numérique. Notons que cette procédure s'applique quelle que soit la saturation de la phase considérée (connexe ou non connexe). Par conséquent, cette approche nous permet d'obtenir les courbes $\bar{k}_{r_{nw}}(S_0)$ et $\bar{k}_{r_w}(S_0)$ pour toutes les valeurs de saturation.

4.6.2 Application aux différents cas d'inclusions

4.6.2.1 Inclusions imperméables

On considère dans un premier temps le cas d'inclusions imperméables. La phase α migre donc dans un milieu délimité par les inclusions et les courants de gravité de la phase β , où $\alpha = w, nw$ et $\beta = nw, w$ (voir Figure 4.29).

Comme le flux gravitaire est symétrique autour de la saturation $S_{max}^m = 0,5$ la courbe de perméabilité effective de la saumure, \bar{k}_{r_w} , et celle du CO_2 , $\bar{k}_{r_{nw}}$, sont également symétriques autour de la saturation $S_{max}^m = 0,5$.

La Figure 4.30 montre les perméabilités relatives mises à l'échelle par la méthode SPA pour différentes géométries de cellule. Les courbes solides avec symboles indiquent la perméabilité relative effective verticale tandis que la courbe discontinue indique la perméabilité de la matrice. Contrairement à la perméabilité de la matrice, la perméabilité relative effective est une fonction concave. Dans ce cas, le point d'arrêt correspond à une saturation moyenne environ égale à 0,48. Le flux entrant associé à ce point conduit à des courants de gravité qui dépassent la distance verticale entre deux inclusions consécutives H_m . Ce flux est plus faible que la valeur maximale F_{thres} discutée au paragraphe 4.2. On constate aussi que la perméabilité relative est indépendante de la géométrie de la cellule, ainsi que de la distance verticale entre strates (résultat non montré). Par contre la perméabilité absolue mise à l'échelle \bar{k}_{abs} en dépend fortement, comme le montre le tableau 4.1.

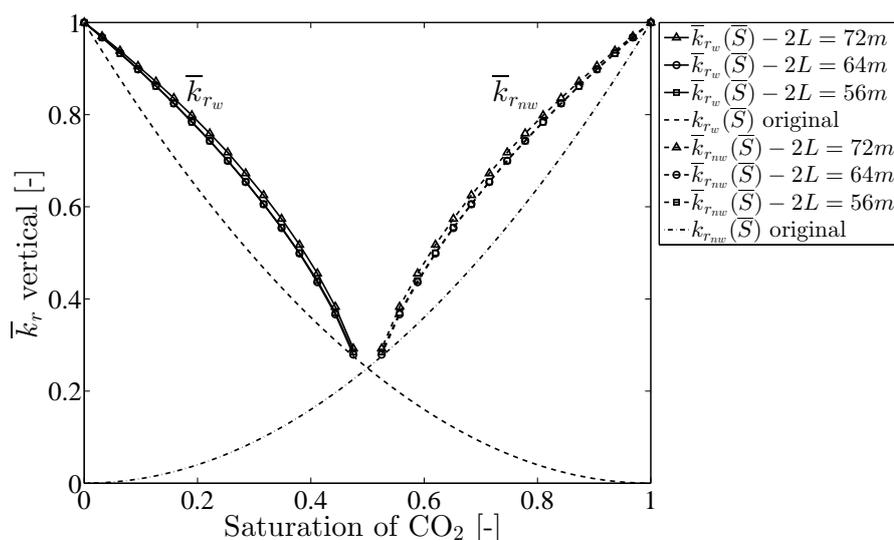


Figure 4.30 – Cas sans capillarité - Inclusions imperméables : perméabilité relative mise à l'échelle obtenue par l'approche SPA dans le cas $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$.

	$2L = 72m$	$2L = 64m$	$2L = 56m$
\bar{k}_{abs} [m^2]	1.298×10^{-13}	1.739×10^{-13}	2.331×10^{-13}

Tableau 4.1 – Cas sans capillarité - Inclusions imperméables : perméabilité absolue effective, obtenue à partir des simulations d'écoulements monophasiques, dans le cas $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$. La perméabilité de la matrice k^m est de $3 \times 10^{-12} m^2$.

Le cas $2L = 72$ [m] est choisi pour intercomparer les approches SPA et NURP (Figure 4.31).

La Figure 4.31 montre une discontinuité des courbes \bar{k}_{r_α} obtenues avec l'approche NURP pour les saturations S_{CO_2} variant entre 0,4 et 0,6, ce qui correspond à des courants de gravité trop épais. Dans le cas des inclusions imperméables, un phénomène complexe apparaît quand l'épaisseur des courants de gravité de la phase α dépasse l'écart vertical entre deux inclusions consécutives H_m . À ce moment, la phase α passe d'un état initial macroscopiquement déconnecté (courant de gravité) à un état connecté, et sa migration dans la matrice peut être décrite comme un écoulement darcéen. À l'inverse, pour l'autre phase β , les courants de gravité commencent à se former et le transfert de la phase β entre les courants n'est plus darcéen. La Figure 4.29 montre un exemple de CO_2 déconnecté (Figure 4.29a) et connecté (Figure 4.29b) et inversement pour la saumure. À ma connaissance, il n'existe aucun modèle mis à l'échelle décrivant cette transition entre un écoulement darcéen et un écoulement en courants de gravité.

On observe également que l'approche SPA rend bien compte de la forme de la courbe \bar{k}_{r_α} quand la saturation S_α est faible, $S_\alpha < 0.2$, quelle que soit la phase $\alpha \in [w, nw]$. Néanmoins, ces deux courbes s'écartent notablement lorsque S_α croit vers 0,5.

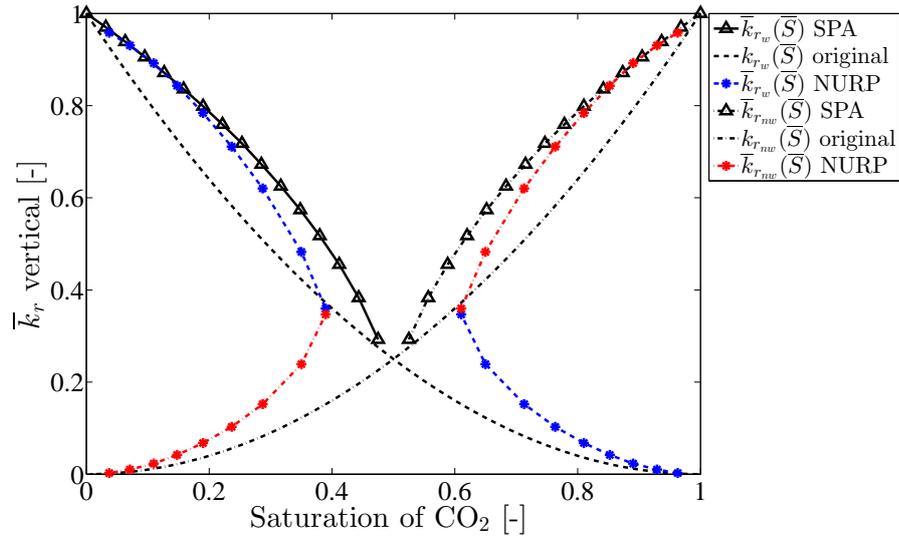


Figure 4.31 – Cas sans capillarité - Inclusions imperméables : perméabilités relatives effectives de la saumure (ligne discontinue bleue avec étoiles) et du CO₂ (ligne discontinue-pointillée rouge avec étoiles), obtenues avec les méthodes SPA et NURP dans le cas $2L = 72m$, $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$.

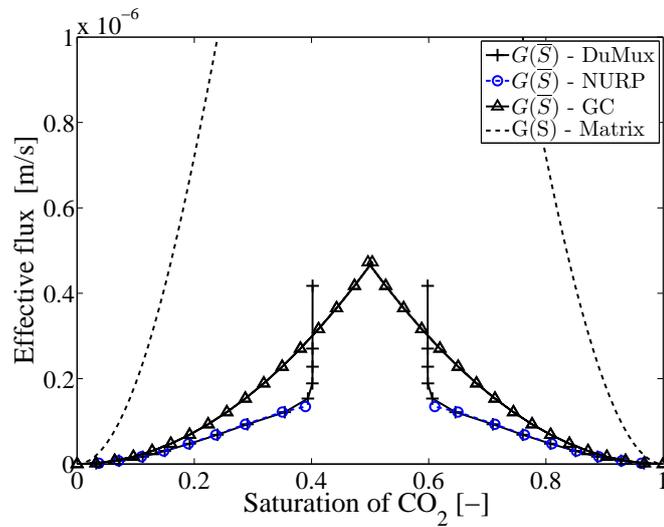


Figure 4.32 – Cas sans capillarité - Inclusions imperméables : flux effectif mis à l'échelle obtenu à partir des simulations diphasiques pour le cas $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$.

Une fois les perméabilités relatives effectives $\bar{k}_{r_{nw}}$ connues, on peut calculer le flux mis à l'échelle :

$$\bar{\Phi}(\bar{S}) = \bar{k}_{abs} \times \bar{\Lambda}(\bar{S}), \quad (4.77)$$

où

$$\bar{\Lambda}(\bar{S}) = \frac{\bar{k}_{r_{nw}}(\bar{S})\bar{k}_{r_w}(\bar{S})}{\bar{k}_{r_{nw}}(\bar{S}) + M \times \bar{k}_{r_w}(\bar{S})}. \quad (4.78)$$

Comme seule l'approche NURP permet de construire sans limitation les courbes $\bar{k}_{r_w}(\bar{S})$ et $\bar{k}_{r_{nw}}(\bar{S})$, le flux effectif est reconstruit à partir des perméabilités relatives calculées avec cette approche. La Figure 4.35 montre une comparaison entre la fonction $\bar{\Phi}(\bar{S})$ reconstruite à partir des résultats obtenus avec l'approche NURP et celle obtenue à partir des simulations numériques avec DuMu^x comme cela a été fait au paragraphe 4.4.1. Le très bon accord entre ces courbes justifie pleinement les hypothèses de l'approche NURP et notamment l'expression proposée pour la vitesse de la phase α mise à l'échelle (équation (4.76)).

4.6.2.2 Inclusions semi-perméables

Considérons maintenant des inclusions semi-perméables. En négligeant l'effet de la fluctuation de vitesse comme discuté au paragraphe 4.4.2, page 98, on peut déterminer analytiquement la carte de saturation et donc la distribution locale de la perméabilité apparente de chaque phase dans la cellule. La perméabilité relative mise à l'échelle est ensuite calculée à partir de simulations d'écoulements monophasiques. Les résultats sont présentés sur la Figure 4.33. Contrairement au cas des inclusions imperméables, la perméabilité relative effective est une fonction convexe constituée de deux parties quasiment linéaires. Le point de discontinuité rend compte de l'apparition (ou disparition) des courants de gravité sous les inclusions semi-perméables. Comme dans le cas précédent des inclusions imperméables, la variation de la longueur influence uniquement la valeur de perméabilité absolue mise à l'échelle (*cf.* tableau 4.2) mais pas les courbes de perméabilité relative effective.

	$2L = 72m$	$2L = 64m$	$2L = 56m$
\bar{k}_{abs} [m ²]	$1,242 \times 10^{-12}$	$1,350 \times 10^{-12}$	$1,458 \times 10^{-12}$

Tableau 4.2 – Cas sans capillarité - Inclusions perméables : perméabilité absolue effective, obtenue à partir des simulations des écoulements monophasiques dans le cas $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$. La perméabilité de la matrice k^m est de 3×10^{-12} m² et celle des inclusions est de 3×10^{-13} m².

La Figure 4.34 montre la comparaison entre les résultats des approches SPA et NURP pour le cas $2L = 72m$, $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$. La discontinuité des courbes numériques obtenues avec la méthode NURP dans le cas des inclusions imperméables, discontinuité liée au changement de régime d'écoulement (connexe - non connexe), n'apparaît plus dans le cas des inclusions semi-perméables car les deux phases sont connectées dans tout le domaine quel que soit le flux imposé à la base de la colonne. On constate que les courbes k_{r_α} obtenues avec les deux méthodes, SPA et NURP, concordent parfaitement.

La comparaison entre le flux effectif calculé à partir de l'approche NURP et celui obtenu à partir des simulations numériques est montré sur la Figure 4.35. On constate que les

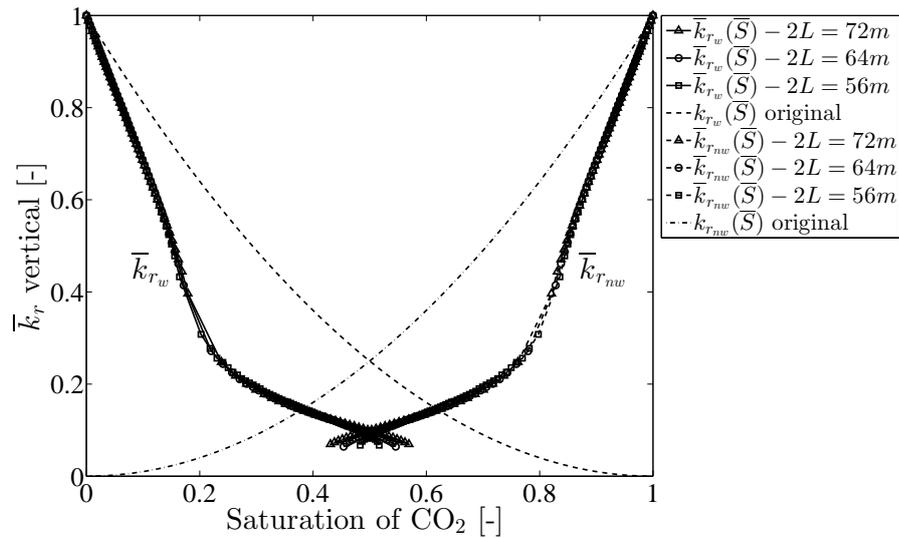


Figure 4.33 – Cas sans capillarité - Inclusions perméables : perméabilité relative mise à l'échelle obtenue à partir des simulations des écoulements monophasiques dans le cas $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$ pour trois géométries de VER.

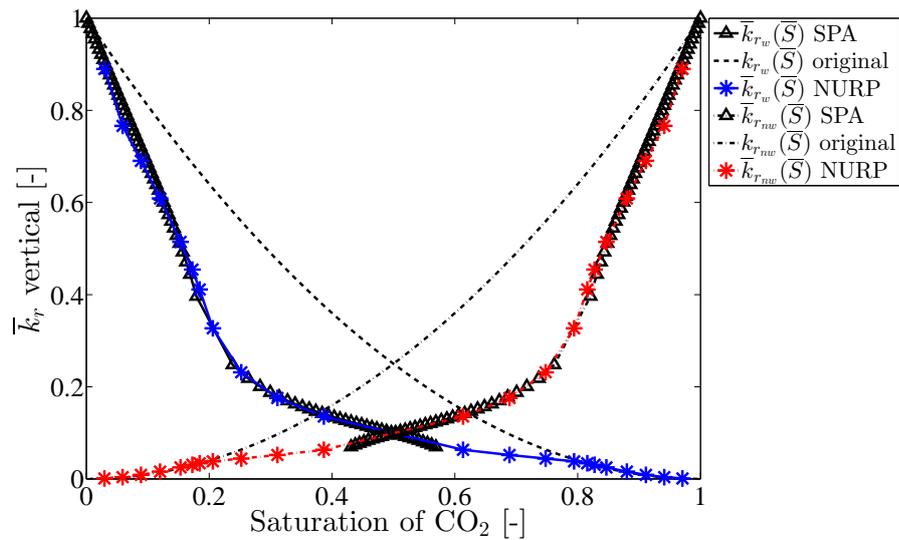


Figure 4.34 – Cas sans capillarité - Inclusions perméables : perméabilités relatives effectives de la saumure (ligne discontinue bleue avec étoiles) et du CO₂ (ligne discontinue-pointillée rouge avec étoiles), obtenues avec les méthodes SPA et NURP dans le cas $2L = 72m$, $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$.

deux courbes coïncident non seulement dans la partie sans courants de gravité, mais aussi dans la partie où des courants de gravité apparaissent. Notons que l'approche GC conduit à un écart au flux effectif NURP et au flux numérique dans la gamme de saturation où les courants de gravité sont présents.

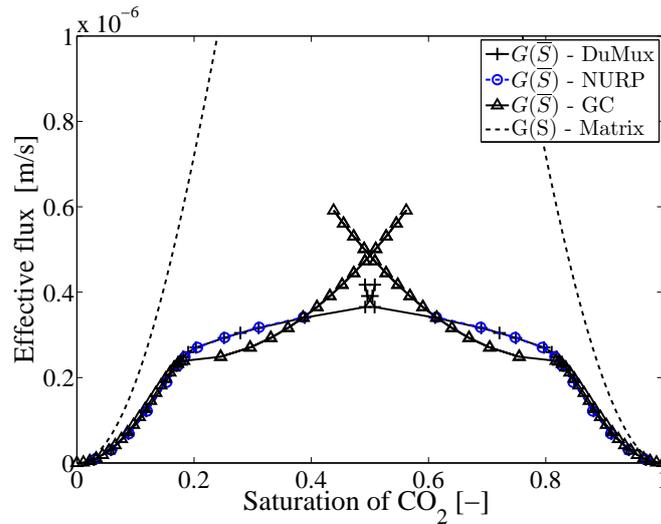


Figure 4.35 – Cas sans capillarité - Inclusions perméables : flux effectif mis à l'échelle obtenu à partir des simulations diphasiques pour le cas $L_0 = 40m$ et $H_c = 10m$.

4.7 Conclusion

Nous avons abordé dans ce chapitre le problème de la mise à l'échelle de l'écoulement principalement gravitaire d'un panache de CO_2 dans un système stratifié périodique bi-dimensionnel. Ce problème se simplifie en un problème de migration de CO_2 dans une colonne verticale à strates discontinues décalées avec des conditions aux limites latérales à flux nul.

Dans un premier temps, nous avons montré qu'il existe un flux gravitaire maximal pouvant pénétrer dans la colonne. Cette analyse a été ensuite validée par des simulations numériques dans une colonne constituée d'une strate isolée et en considérant le rapport entre le flux sortant et entrant autour et à travers la strate pour différentes saturations imposées en bas de colonne.

Nous avons ensuite effectué un développement asymptotique à double échelle. Celui-ci montre que, lorsque la gravité est dominante, l'équation de transport à grande échelle est de type Buckley-Leverett et le flux mis à l'échelle est donné par la résolution d'un problème local non standard. La particularité de ce problème est notamment liée à la stratification sous l'effet de gravité du CO_2 dans les cellules, ce qui ne peut pas être décrit par la méthode d'homogénéisation classique. Le problème local est donc résolu à l'aide de l'approche GC (Gravity Current). Nous avons étendu ensuite cette approche au cas des strates semi-perméables et en tenant compte de la capillarité.

Le flux mis à l'échelle est comparé à celui obtenu à partir des simulations numériques pour différents types de strates, avec ou sans pression capillaire. Nous avons montré que l'approche GC n'est valide que pour des saturations imposées faibles, ce qui conduit à des courants de gravité de faible épaisseur par rapport à leur extension longitudinale.

Enfin, nous avons appliqué les méthodes SPA (Single Phase Averaging) et NURP (Numerical Upscaled Relative Permeability) pour déterminer les perméabilités relatives mises à l'échelle du CO₂, $\bar{k}_{r_{nw}}$, et de la saumure, \bar{k}_{r_w} , dans le cas sans capillarité. L'approche semi-analytique SPA est basée sur des simulations d'écoulements monophasiques de chaque phase dans un milieu nouveau dont la distribution de perméabilité est déterminée analytiquement par l'approche GC. Cette approche ne peut s'appliquer au calcul de \bar{k}_{r_α} que pour des saturations S_α faibles. Cela implique donc deux conditions : (i) la hauteur des courants de gravité doit être plus petite que l'écart vertical entre deux inclusions, et (ii) le flux entrant ne peut pas dépasser la valeur maximale du flux gravitaire. Les perméabilités relatives effectives ainsi obtenues concordent parfaitement avec les perméabilités calculées numériquement, tout particulièrement pour des strates perméables quand les deux phases sont connectées dans tout le domaine. L'approche NURP est basée sur une détermination numérique de perméabilités relatives. Elle permet de s'affranchir des contraintes liées à l'approche SPA, et, de ce fait, elle conduit à de très bons résultats.

4.8 Appendice - Flux gravitaire effectif d'un milieu 1D avec variation de perméabilité, cas sans capillarité

Notons S_+ et S_- les saturations dans les couches respectivement perméable et peu perméable, saturations supposées être constantes. w_+ et w_- sont respectivement la fraction volumique correspondante de chaque couche dans une cellule. La saturation effective est la moyenne arithmétique dans tout le domaine :

$$\bar{S} = w_+ S_+ + w_- S_- . \quad (4.79)$$

Mouche *et al.* (2010) ont traité un cas particulier où la fraction volumique $w_+ = w_- = \frac{1}{2}$. Selon cet article, le flux gravitaire mis à l'échelle est la moyenne harmonique des flux dans les couches et la contribution du flux dans la matrice est donc dominante. Dans notre travail, nous essayons d'établir une formule générale du flux mis à l'échelle \bar{G} qui pourrait être valide pour toutes les valeurs de fraction volumique.

Commençons en écrivant : $S_+ = \bar{S} - w_- \delta \bar{S}$ et $S_- = \bar{S} + w_+ \delta \bar{S}$ avec $\delta \bar{S} = S_- - S_+$. La continuité du flux dans l'équation (4.55) se réécrit $\bar{G} = k_+ \Lambda(\bar{S} - w_- \delta \bar{S}) = k_- \Lambda(\bar{S} + w_+ \delta \bar{S})$. Développons la fonction Λ jusqu'au deuxième ordre en $\delta \bar{S}$:

$$\Lambda(\bar{S} - w_- \delta \bar{S}) \simeq \Lambda(\bar{S}) - w_- \delta \bar{S} \Lambda'(\bar{S}) + \frac{1}{2} w_-^2 \delta \bar{S}^2 \Lambda''(\bar{S}) \quad (4.80)$$

$$\Lambda(\bar{S} + w_+ \delta \bar{S}) \simeq \Lambda(\bar{S}) + w_+ \delta \bar{S} \Lambda'(\bar{S}) + \frac{1}{2} w_+^2 \delta \bar{S}^2 \Lambda''(\bar{S}) \quad (4.81)$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \left(\frac{w_-^2}{k_-} - \frac{w_+^2}{k_+} \right) \bar{G} &= w_-^2 \Lambda(\bar{S} + \delta \bar{S}) - w_+^2 \Lambda(\bar{S} - \delta \bar{S}) \\ &= (w_-^2 - w_+^2) \Lambda(\bar{S}) + w_- w_+ \delta \bar{S} \Lambda'(\bar{S}) \end{aligned} \quad (4.82)$$

et

$$\begin{aligned} \left(\frac{w_-}{k_-} + \frac{w_+}{k_+}\right) \bar{G} &= w_- \Lambda(\bar{S} + \delta\bar{S}) - w_+ \Lambda(\bar{S} - \delta\bar{S}) \\ &= \Lambda(\bar{S}) + \frac{1}{2} w_- w_+ \delta\bar{S}^2 \Lambda''(\bar{S}) \end{aligned} \quad (4.83)$$

À partir de l'équation (4.82), on déduit :

$$\delta\bar{S} = \frac{1}{w_- w_+ \Lambda'(\bar{S})} \left[\left(\frac{w_-^2}{k_-} - \frac{w_+^2}{k_+} \right) \bar{G} - (w_-^2 - w_+^2) \Lambda(\bar{S}) \right]. \quad (4.84)$$

La combinaison des équation (4.84) et (4.83) conduit à :

$$\beta(k_-, k_+) \bar{G} = \Lambda(\bar{S}) + \frac{\Lambda''(\bar{S})}{2w_- w_+ (\Lambda'(\bar{S}))^2} \left[\alpha(k_-, k_+) \bar{G} - (w_-^2 - w_+^2) \Lambda(\bar{S}) \right]^2, \quad (4.85)$$

où $\alpha(k_-, k_+) = \frac{w_-^2}{k_-} - \frac{w_+^2}{k_+}$ et $\beta(k_-, k_+) = \frac{w_-}{k_-} + \frac{w_+}{k_+}$.

Finalement, le flux effectif \bar{G} s'écrit

$$\bar{G}(\bar{S}) = \frac{\psi(\bar{S}) - \sqrt{\psi(\bar{S})^2 - \chi(\bar{S})(\alpha(k_-, k_+))^2}}{(\alpha(k_-, k_+))^2}, \quad (4.86)$$

où

$$\psi(\bar{S}) = (w_+^2 - w_-^2) \Lambda(\bar{S}) \alpha(k_-, k_+) + \frac{w_- w_+ (\Lambda'(\bar{S}))^2}{\Lambda''(\bar{S})} \beta(k_-, k_+), \quad (4.87)$$

et

$$\chi(\bar{S}) = (w_-^2 - w_+^2)^2 \Lambda(\bar{S})^2 + \frac{2w_- w_+ (\Lambda'(\bar{S}))^2}{\Lambda''(\bar{S})} \Lambda(\bar{S}). \quad (4.88)$$

Si on néglige le terme $\delta\bar{S}^2$, on peut déduire $\bar{G}(\bar{S})$ facilement à partir des équations (4.80) et (4.81) :

$$\bar{G}(\bar{S}) = \frac{1}{\frac{w_-}{k_-} + \frac{w_+}{k_+}} \Lambda(\bar{S}). \quad (4.89)$$

On constate que le flux mis à l'échelle est également la moyenne harmonique dans tout le domaine. Le résultat obtenu dans ce travail est donc comparable à celui de Mouche *et al.* (2010).

Bibliographie

- ATAIE-ASHTIANI, B., HASSANIZADEH, S., OOSTROM, M., CELIA, M. et WHITE, M. D. (2001). Effective parameters for two-phase flow in a porous medium with periodic heterogeneities. *Journal of contaminant hydrology*, 49(1):87–109.
- BRAUN, C., HELMIG, R. et MANTHEY, S. (2005). Macro-scale effective constitutive relationships for two-phase flow processes in heterogeneous porous media with emphasis on the relative permeability–saturation relationship. *Journal of contaminant hydrology*, 76(1):47–85.
- DURLOFSKY, L. J. (1991). Numerical calculation of equivalent grid block permeability tensors for heterogeneous porous media. *Water resources research*, 27(5):699–708.
- DYKAAR, B. B. et KITANIDIS, P. K. (1992). Determination of the effective hydraulic conductivity for heterogeneous porous media using a numerical spectral approach : 1. method. *Water Resources Research*, 28(4):1155–1166.
- EICHEL, H., HELMIG, R., NEUWEILER, I. et CIRPKA, O. (2005). Upscaling of two-phase flow processes in porous media. In DAS, D. et HASSANIZADEH, S., éditeurs : *Upscaling Multiphase Flow in Porous Media*, pages 237–257. Springer Netherlands.
- FLEMISCH, B., DARCIS, M., ERBERTSEDER, K., FAIGLE, B., LAUSER, A., MOSTHAF, K., MÜTHING, S., NUSKE, P., TATOMIR, A., WOLFF, M. *et al.* (2011). Dumu^x : DUNE for multi-{phase, component, scale, physics,...} flow and transport in porous media. *Advances in Water Resources*, 34(9):1102–1112.
- GOLDING, M. J., NEUFELD, J. A., HESSE, M. A. et HUPPERT, H. E. (2011). Two-phase gravity currents in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 678:248–270.
- GREEN, C. P. et ENNIS-KING, J. (2013). Residual trapping beneath impermeable barriers during buoyant migration of CO₂. *Transport in porous media*, 98(3):505–524.
- HAYEK, M., MOUCHE, E. et MÜGLER, C. (2009). Modeling vertical stratification of CO₂ injected into a deep layered aquifer. *Advances in Water Resources*, 32(3):450 – 462.
- HESSE, M. et WOODS, A. (2010). Buoyant dispersal of CO₂ during geological storage. *Geophysical Research Letters*, 37(1).
- MIKELIC, A., van DUIJN, C. et POP, I. (2002). Effective equations for two-phase flow with trapping on the micro scale. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 62(5):1531–1568.
- MOUCHE, E., HAYEK, M. et MÜGLER, C. (2010). Upscaling of CO₂ vertical migration through a periodic layered porous medium : The capillary-free and capillary-dominant cases. *Advances in Water Resources*, 33(9):1164 – 1175.
- PANFILOV, M. et FLORIAT, S. (2004). Nonlinear two-phase mixing in heterogeneous porous media. *Transport in porous media*, 57(3):347–375.
- SZYMKIEWICZ, A., HELMIG, R. et KUHNKE, H. (2011). Two-phase flow in heterogeneous porous media with non-wetting phase trapping. *Transport in porous media*, 86(1):27–47.

- VAN DUIJN, C. J., EICHEL, H., HELMIG, R. et POP, I. S. (2007). Effective equations for two-phase flow in porous media : the effect of trapping on the microscale. *Transport in porous media*, 69(3):411–428.
- WEN, X., DURLOFSKY, L. et EDWARDS, M. (2003). Use of border regions for improved permeability upscaling. *Mathematical Geology*, 35(5):521–547.

Chapitre 5

Simulation numérique de l'injection de CO₂ dans des milieux 3D

La vie, c'est comme une bicyclette, il faut avancer pour ne pas perdre l'équilibre.

Albert Einstein

Sommaire

5.1	Introduction	126
5.2	Présentation du code DuMu ^x	127
5.3	Mesure des performances du code DuMu ^x	132
5.4	Injection de CO ₂ dans un réservoir hétérogène tridimensionnel	139
5.5	Conclusion et perspectives	145
5.6	Appendice - Panorama des codes utilisés pour la séquestration géologique de CO ₂	146
5.7	Appendice - Variation du nombre d'itérations pour le cas Implicite - ALUGrid - 2p	147
	Bibliographie	148

5.1 Introduction

Au vu de la complexité des questions soulevées par la physique de l'écoulement diphasique CO_2 -saumure en 2D, l'application de la méthode de mise à l'échelle analytique au cas 3D n'est pas envisageable pour l'instant. Par ailleurs, une mise à l'échelle numérique nécessite de travailler sur des blocs d'un million de mailles minimum. Nous envisageons donc ici le problème 3D de façon prospective, et essentiellement en termes d'outils numériques et de parallélisation. Concrètement nous étudions ici les performances de calcul d'un écoulement diphasique CO_2 -saumure dans un réservoir tridimensionnel de grande échelle, homogène et hétérogène, initialement saturé en eau.

À l'heure actuelle, plusieurs simulateurs numériques permettent de traiter le problème d'un écoulement diphasique 3D dans un réservoir hétérogène. La complexité du code et l'efficacité des calculs dépendent fortement des caractéristiques physiques de l'écoulement (nombre de phases, nombre de composants considérés) ainsi que de la méthode de discrétisation utilisée et du schéma numérique spatio-temporel. Le tableau 5.5 dans l'appendice 5.6 résume les caractéristiques de quelques codes ou outils disponibles pour la simulation numérique de problèmes physiques divers liés au contexte du stockage géologique du CO_2 (Jiang, 2011).

Dans le cadre de cette thèse, nous avons choisi le code DuMu^x (Flemisch *et al.*, 2011) développé par l'université de Stuttgart pour les raisons suivantes. Premièrement, DuMu^x est un code source libre entièrement accessible sur Internet. Deuxièmement, un grand nombre de modèles physiques sont disponibles dans DuMu^x et permettent ainsi de traiter nombre de situations physiques. Finalement, le code DuMu^x est doté d'une capacité de calcul parallèle. Cela nous permet, non seulement l'exécution plus rapide du programme en distribuant le travail, mais aussi la résolution des problèmes plus gros, ce qui exige cependant plus de ressource matérielle accessible, notamment la mémoire.

L'objectif de ce présent chapitre est d'étudier les performances du code DuMu^x pour simuler par calcul parallèle l'injection et la migration de CO_2 dans différents types de milieu 3D (homogène et hétérogène). Pour cela, nous considérons soit des problèmes simplifiés en appliquant l'hypothèse des écoulements incompressibles et immiscibles, soit des problèmes plus complexes mettant en jeu plusieurs difficultés (écoulement compressible prenant en compte le changement de phases ou/avec de fortes hétérogénéités du milieu).

Ce chapitre est organisé comme suit. La section 5.2 est dédiée à la présentation du code DuMu^x. Nous nous sommes fortement inspirés du manuel du code, accessible sur le site <http://www.dumux.org>. Ensuite, nous présentons dans la section 5.3 les mesures de performance du code DuMu^x en simulant sur un gros maillage de plus un million d'éléments l'écoulement incompressible et immiscible d'un mélange diphasique CO_2 eau dans un milieu homogène. Nous étudions l'influence du schéma numérique utilisé, de la discrétisation et la décomposition du domaine sur l'efficacité parallèle du code. Enfin, dans la dernière section 5.4, nous montrons quelques résultats des simulations numériques en vue d'illustrer l'effet de l'hétérogénéité du réservoir sur la migration du panache de CO_2 pendant la période d'injection.

5.2 Présentation du code DuMu^x

5.2.1 Présentation générale

Le code DuMu^x (<http://www.dumux.org>) est un simulateur fondé sur **DUNE** pour l'écoulement et le transport **multi**phasique, **multi**-composant, **multi**-physique ... dans les milieux poreux. DUNE (Distributed and Unified Numerics Environment) est un outil modulaire pour la résolution des équations différentielles partielles par des méthodes basés sur maillages. Les modules principaux de DUNE sont `dune-geometry`, `dune-common`, `dune-istl`, `dune-grid` et `dune-localfunction`. En outre, il existe plusieurs modules externes qui se fondent sur la base de DUNE tels que `dune-pdelab`, `dune-multidomaingrid`... et DuMu^x fait partie de ces modules. La contribution principale de DuMu^x est l'implémentation des modèles physiques et mathématiques du transport et de l'écoulement en milieu poreux. DUNE et DuMu^x sont tous les deux codés sous C++, langage de programmation à haut-niveau, ce qui assure l'efficacité et favorise le calcul haute-performance (HPC).

5.2.2 Schéma de discrétisation spatiale

Plusieurs modèles de discrétisation spatiale sont intégrés dans DuMu^x, tels que le schéma de boîte (*box method*, BM), le schéma volume finis centré *cell-centered* (CCFV) et schéma différences finies (*Mimetic Finite Difference*, MFD). Cependant, à la connaissance de l'auteur et jusqu'à maintenant, seul le schéma CCFV fonctionne correctement en parallèle dans DuMu^x. Les simulations parallèles utilisant le schéma boîte sont, dans certains cas, plus lentes que celles en mode séquentiel. Par conséquent, nous utiliserons uniquement le schéma CCFV pour le calcul parallèle.

La méthode CCFV utilise les éléments du maillage comme volumes de contrôle (CV) (voir Figure 5.1). Considérons deux volumes de contrôle CV_i et CV_j . On désigne par C_i et C_j les centres de CV_i et CV_j respectivement. Toutes les variables primaires tels que la pression de phase, la saturation de phase ... sont attachées aux centres C_i , C_j des volumes de contrôle. En revanche, les flux massiques et énergétiques sont déterminés au point d'intégration qui est l'intersection de la droite C_iC_j et la surface partagée entre CV_i et CV_j . Ces flux peuvent être calculés de différentes façons, en utilisant la méthode TPFA (Two-Point Flux Approximation) classique ou MPFA (Multi-Point Flux Approximation).

Dans le schéma TPFA, le flux entre CV_i et CV_j peut être calculé directement à partir des informations aux points C_i et C_j . Par conséquent, ce schéma peut produire des erreurs importantes dans les cas suivants : (i) - le maillage est non-orthogonal ; (ii) - le maillages est non-conforme avec des nœuds suspendus liés, par exemple, au raffinement local ; et (iii) - le tenseur de perméabilité est non-diagonal, i.e. la direction du maillage n'est pas aligné suivant la direction du tenseur de perméabilité.

Dans le schéma MPFA, le calcul du flux entre deux volumes de contrôle prend en compte aussi bien des informations aux nœuds des éléments en question qu'aux volumes de contrôle avoisinants. Cette méthode conduit donc à une discrétisation correcte des équations d'écoulement et de transport sur des maillages en quadrilatères et hexaèdres géné-

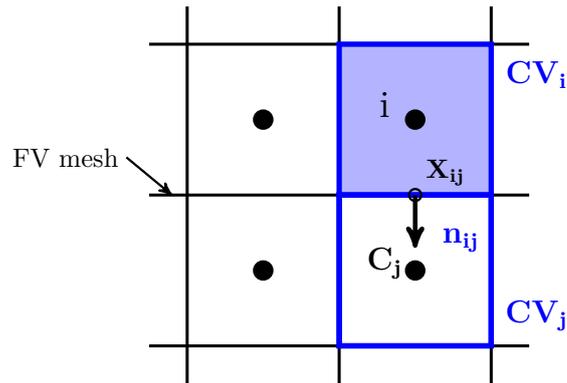


Figure 5.1 – Discrétisation de la méthode CCFV.

raux (Aavatsmark *et al.*, 1994; Ware *et al.*, 1995; Aavatsmark *et al.*, 1996; Aavatsmark, 2002, 2007).

Néanmoins, puisque dans le chapitre présent ainsi que dans les précédents, tous les maillages utilisés sont uniformes et orthogonaux, nous utilisons le schéma TPFA pour la discrétisation spatiale des simulations.

5.2.3 Schéma de discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle du code DuMu^x s'effectue à l'aide de la méthode d'Euler implicite. Toutes les dérivées temporelles sont calculées par une approximation avec décentrage amont.

5.2.4 Modèles disponibles pour la simulation de la migration de CO_2

5.2.4.1 Classification des modèles

Dans DuMu^x, les modèles peuvent être classifiés soit selon le schéma numérique utilisé, soit selon le système physique étudié.

a) Selon le schéma numérique :

Mathématiquement, les modèles disponibles dans DuMu^x se distinguent en deux types principaux : modèles implicites (couplés) et modèles découplés.

- Modèles implicites (couplés) :

Pour les modèles couplés, l'ensemble des équations de continuité et de vitesse est résolu implicitement.

- Modèles découplés :

Les modèles découplés sont basés sur l'idée de reformuler les équations en une équation pour la pression et d'autres équations pour le transport des phases ou composants. Le nouveau système d'équations peut être résolu séparément de l'équation en pression. Le schéma le plus connu est la formulation du flux fractionnaire qui utilise l'algorithme IMPES (IMplicite Pressure - Explicite Saturation), dont le pas de temps est limité par la condition de stabilité bien connue de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

Initialement conçue pour les applications dans le domaine pétrolier (Aziz et Settari, 1979; Chen et Ewing, 1997; Chen et Durlinsky, 2006), la formulation en flux fractionnaire est désormais largement utilisée pour la modélisation des écoulements multiphasiques en milieux poreux. Cette approche est basée sur l'idée de considérer le flux de phase comme une fraction de flux, ou flux fractionnaire, du flux total. Le système d'équations de continuité et de vitesse peut s'écrire en une équation pour la pression et une autre équation pour le transport. Le travail pionnier de Buckley *et al.* (1942) utilisant la formulation de flux fractionnaire a traité la migration immiscible dans un domaine unidimensionnel. On peut également citer les travaux plus récents de Chavent et Jaffré (1986) et Cao *et al.* (2007) qui étendent cette approche pour des écoulements diphasiques en milieu poreux.

En fonction de la non linéarité du système et des relations constitutives, Les équations sont, soit quasiment découplées soit faiblement couplées. Ces équations peuvent être résolues séparément à l'aide de l'algorithme IMPES (IMplicite en Pression, et Explicite en Saturation) (Aziz et Settari, 1979; Coats *et al.*, 2000; Chen *et al.*, 2004). Cet algorithme est très efficace pour des problèmes simplifiés, par exemple la production de pétrole en négligeant la gravité et la capillarité. Cependant, avec la complexité croissante du problème le couplage non-linéaire des équations conduit à des pas de temps très petits et réduit donc considérablement l'efficacité de cet algorithme.

b) Selon le système physique étudié :

Il existe dans DuMu^x différents modèles physiques de complexité croissante, de l'écoulement stationnaire monophasique mono-composant isotherme à l'écoulement non-isotherme multiphasique multi-composant. Néanmoins, dans ce manuscrit, nous étudions seulement les deux systèmes physiques principaux : système diphasique (2p) et système diphasique constitué de deux composants (2p2c). Dans ces deux systèmes, la compressibilité du solide et la réaction chimique entre phases ne sont pas prises en compte. La formulation de chaque modèle est présentée plus en détail dans le paragraphe 5.2.4.2.

- **Modèle 2p :**

Pour des applications dans le contexte du stockage de CO₂, le modèle d'écoulement diphasique incompressible et immiscible est suffisant. La majeure partie du CO₂ reste dans un état supercritique pendant et peu de temps après la période d'injection. Dans ce modèle, le système diphasique se compose d'une phase mouillante riche en saumure (wetting) et une phase non-mouillante riche en CO₂ (non wetting).

- **Modèle 2p2c :**

Une partie du CO₂ peut se dissoudre dans la saumure dès qu'il est en contact avec elle. Réciproquement, la saumure peut également, de son côté, se dissoudre dans la phase

riche en CO₂. Ce phénomène complexe doit être pris en compte dans les modèles mathématiques. Pour cela, il existe dans DuMu^x le modèle 2p2c dédié aux écoulements compressibles et miscibles. On suppose que la phase non-mouillante riche en CO₂ comprend un maximum de deux composants (H₂O et CO₂), tandis que la phase riche en saumure peut inclure jusqu'à trois composants (CO₂, H₂O et le chlorure de sodium dissous NaCl). En outre, on suppose que la fraction massique de NaCl demeure constante et cette fraction intervient uniquement dans la fonction de solubilité. Par conséquent, seuls les composants CO₂, H₂O apparaissent dans la formulation du bilan de masse dans le paragraphe 5.2.4.2.

5.2.4.2 Formulation des modèles

Pour chaque modèle, on définit les variables primaires du modèle pour lesquelles les équations de continuité de masse sont résolues. Les autres variables peuvent être calculés à partir des variables primaires.

Commençons par rappeler des notations utilisées.

α	: indice de phase, $\alpha \in \{w, n\}$
κ	: indice de composant, $\kappa \in \{l, g\}$
p_α	: pression de phase,
S_α	: saturation de phase,
v_α	: vitesse de phase,
x_α^κ	: fraction molaire du composant κ dans la phase α ,
q_α^κ	: terme source du composant κ dans la phase α ,
D_α^κ	: diffusivité du composant κ dans la phase α ,
M	: masse molaire de la phase ou composant,
k_{r_α}	: perméabilité relative de la phase α ,
μ_α	: viscosité de la phase α ,
v_α	: vitesse darcyenne de la phase α ,
ϕ	: porosité,
\mathbf{K}	: tenseur de perméabilité intrinsèque,
\mathbf{g}	: accélération gravitationnelle,
τ	: tortuosité,
$\rho_{mol,\alpha}$: densité molaire de la phase α ,
$\rho_{mass,\alpha}$: densité massique de la phase α ,
C^κ	: masse par unité volumique du composant κ ,

a) Modèle 2p implicite :

Comme présenté tout le long de ce manuscrit, l'écoulement diphasique de deux fluides incompressibles $\alpha \in \{w, nw\}$ est décrit par l'équation de vitesse darcyenne et le bilan de masse :

- Vitesse de la phase α :

$$v_\alpha = -\frac{k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbf{K} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}). \quad (5.1)$$

- Bilan de masse de la phase α :

$$\phi \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} - \nabla \cdot \frac{k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbf{K} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}) - q_\alpha = 0. \quad (5.2)$$

La relation entre la pression capillaire $p_c = p_{nw} - p_w$ et les relations constitutives nous conduisent à un système à deux variables primaires soit p_w et S_{nw} , soit p_{nw} et S_w .

b) Modèle 2p découplé :

L'équation de pression de la phase non-mouillante s'écrit :

$$\nabla \cdot [-\lambda_t \mathbf{K} \nabla p_{nw} + \lambda_w \mathbf{K} \nabla p_c - \mathbf{K} (\lambda_w \rho_{nw} + \lambda_w \rho_{nw}) g z] = q_t, \quad (5.3)$$

L'équation de transport pour la phase non-mouillante s'écrit :

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\frac{\lambda_{nw}}{\lambda_{nw} + \lambda_w} v_t + \frac{\lambda_{nw} \lambda_w}{\lambda_{nw} + \lambda_w} \mathbf{K} (\rho_w - \rho_{nw}) g \nabla z - \frac{\lambda_{nw} \lambda_w}{\lambda_{nw} + \lambda_w} \mathbf{K} \nabla p_c \right] = q_{nw}. \quad (5.4)$$

Dans l'algorithme IMPES, l'équation (5.3) est résolue implicitement pour déterminer le champs de pression, tandis que la saturation de phase peut être calculée explicitement à partir de l'équation (5.4). Pour que cette méthode soit valide, il faut supposer que les équations (5.3) et (5.4) sont faiblement couplées.

c) Modèle 2p2c implicite

Les équations de continuité pour le système compositionnel sous la condition isothermique peuvent être écrites par une formulation molaire ou massique. Dans ce qui suit, l'équation de continuité du composant κ dans la phase α ($\kappa \in \{H_2O, CO_2\}$, $\alpha \in \{w, n\}$) s'écrit seulement sous forme massique :

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial \sum_\alpha \rho_{mass,\alpha} X_\alpha^\kappa}{\partial t} - \sum_\alpha \nabla \cdot \left(\frac{k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} \rho_{mass,\alpha} X_\alpha^\kappa \mathbf{K} (\nabla p_\alpha - \rho_{mass,\alpha} \mathbf{g}) \right) \\ - \sum_\alpha \nabla \cdot (\tau \phi S_\alpha D_\alpha^\kappa \rho_{mass,\alpha} \nabla X_\alpha^\kappa) - \sum_\alpha q_\alpha^\kappa = 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Le modèle 2p2c découplé ne sera pas étudié dans ce manuscrit.

5.2.5 Parallélisation

DuMu^x est parallélisable et exploite la capacité existante de DUNE (Bastian *et al.*, 2008b,a) pour des calculs en parallèle. La parallélisation dans DUNE et DuMu^x s'effectue à l'aide d'un paradigme de programmation parallèle de type Single-Program-Multiple-Data (SPMD). Dans ce type de programmation, chaque processeur exécute un programme commun mais sur des données différentes, ceux qui sont en effet un sous-ensemble des données du problème global. Ensuite, le transfert de données aux frontières entre les sous-domaines est réalisé en utilisant le protocole de communication MPI (Message Passing Interface).

La performance de calcul d'un programme parallélisé dépend de nombreux facteurs, y compris la répartition de charge entre les processeurs. Une bonne répartition de charge permet de limiter le temps d'inactivité des processeurs, *i.e.* la différence entre les temps de calcul du processeur le plus lent et le plus rapide à chaque pas de temps. Dans DuMu^x, la répartition de charge s'effectue automatiquement par défaut en utilisant Metis (Karypis et Kumar, 1998) et/ou Parmetis (Karypis *et al.*, 1997). En outre, l'efficacité de la parallélisation du code peut être impactée par la décomposition et le transfert de données, et le solveur utilisé. Néanmoins, dans ce travail, seul l'influence de maillage est étudié. Le solveur linéaire AMG-BackEnd (Algebraic MultiGrid linear solver) du module `dune-pdelab`, qui est recommandé par le développeur du code, est utilisé pour tous les cas tests. Un des avantages primordiaux de DUNE et DuMu^x est la mise en œuvre des différents types de maillage dont les décompositions de données sont différentes. L'utilisation de certains types de maillage pour nos cas tests est discutée plus en détail dans la section 5.3.

Notre contribution principale au développement du code concerne le traitement des données entrantes pour les calculs parallèles dans les milieux fortement hétérogènes et dont les caractéristiques géologiques sont fournies par des fichiers de données extérieures. La difficulté rencontrée est liée au fait que chaque processeur a une carte des indices des éléments différente des autres cartes. Par conséquent, le programme "classique" de DuMu^x, qui fonctionne en mode séquentiel, conduit à une mauvaise représentation des hétérogénéités du milieu étudié. Afin d'éviter cette erreur, nous avons développé une procédure dans DuMu^x qui, dans un premier temps, crée un maillage global sur un seul processeur et lit les paramètres géologiques (perméabilité, porosité,...) à partir de ce processeur, et dans un second temps, attribue les données aux éléments (mailles ou sommets) de tous les processeurs avant d'exécuter le programme.

5.3 Mesure des performances du code DuMu^x

En vue d'évaluer les performances du code DuMu^x sur notre machine, nous simulons l'injection et la migration de CO_2 dans un réservoir tridimensionnel qui est discrétisé en un maillage suffisamment gros. L'idée est d'effectuer un *strong scaling*, c'est à dire de regarder la variation du temps de calcul en changeant le nombre des processeurs utilisés pour une dimension fixée du problème. Les deux schémas numérique, Implicite et IMPES, sont considérés. En outre, pour étudier l'influence de la méthode de décomposition sur les performances de calcul, deux types de maillages sont examinés : les maillages de type ALUGrid et ceux de type YaspGrid. Ces deux types de maillage se différencient par leur façon de définir les entités partagées entre les processeurs à la frontière d'un sous-domaine (voir Bastian *et al.* (2008b) pour des informations plus détaillées). Notons que YaspGrid est limité pour des maillages cartésiens structurés, tandis que ALUGrid nous permet l'implémentation des maillages non-structurés (Dedner *et al.*, 2014). Le calculs en mode séquentiel avec YaspGrid est souvent plus rapide que celui avec ALUGrid (Dedner *et al.*, 2012). Néanmoins la justesse de cette remarque pour les calculs parallèles est à vérifier.

5.3.1 Présentation du problème

Pour cette étude, nous considérons le problème simple d'un écoulement diphasique incompressible (modèle 2p) dans un milieu homogène. La dimension du milieu étudié est celle du deuxième problème du benchmark SPE 10 (Christie *et al.*, 2001), soit 6400 m × 8800 m × 170 m. Le maillage original du domaine se compose de 60 × 220 × 85 (1.122.000) mailles. Comme on considère le modèle 2p, on a 2 degrés de liberté (i.e. inconnus) par élément, soit plus de 2 millions degrés de liberté.

On injecte le CO₂ dans le réservoir à travers un puits d'injection qui se trouve à un coin du domaine ($X = 0, Y = 0$) avec un débit massique de 15 kg/s (0,4734 Mt/an) durant 20 ans. L'eau peut sortir par un autre puits de production au coin opposé ($X = 6400$ m, $Y = 8800$ m) comme illustré dans la Figure 5.2. Tous les bords sont imperméables aux deux fluides. La capillarité est négligée. Le milieu est initialement saturé en saumure et sa pression initiale suit une loi hydrostatique. Les paramètres physiques des fluides sont résumés dans le tableau 5.1.

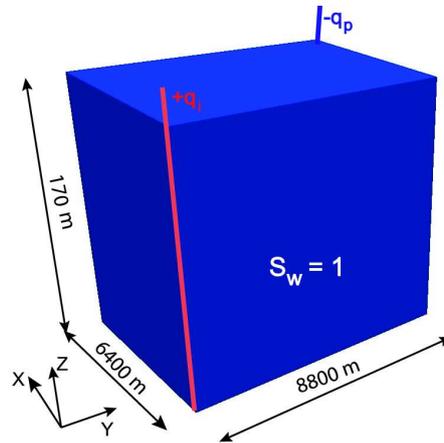


Figure 5.2 – Configuration du cas de test de performance : milieu 3D homogène avec un puits d'injection et un autre puits de production en deux coins opposés du domaine. Chaque puits s'étend verticalement à travers tout le réservoir. La dimension suivant l'axe Z est multipliée par un facteur de 50.

	CO ₂	Saumure
Densité [kg/m ³]	710	1050
Viscosité [Pa.s]	8×10^{-4}	8×10^{-5}
Saturation résiduelle [-]	0.0	0.0

Tableau 5.1 – Paramètres physiques des fluides pour des simulations utilisant le modèle 2p.

Les perméabilités relatives du CO₂ et de la saumure sont quadratiques (Eqs. (3.6) et (3.7)). La perméabilité absolue et la porosité du milieu homogène étudié sont calculées à partir du modèle hétérogène SPE 10 original. Concrètement, la porosité est égale à $\phi =$

0,1706, la moyenne arithmétique de celles du modèle SPE 10, tandis que la perméabilité suivant chaque axe est la moyenne harmonique :

$$\begin{pmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9,9505 \times 10^{-12} & 0 & 0 \\ 0 & 9,9505 \times 10^{-12} & 0 \\ 0 & 0 & 6,8495 \times 10^{-15} \end{pmatrix}$$

5.3.2 Récapitulatif des simulations

Le cas de test présenté dans le paragraphe précédent 5.3.1 est calculé avec des schémas numériques et des types de maillage différents :

- Schéma implicite - ALUGrid,
- Schéma découplé IMPES - ALUGrid,
- Schéma implicite - YaspGrid.

Tous les simulations en parallèle sont réalisées sur la grappe de calcul du BRGM, qui comprend 24 nœuds de calcul standard avec 24 cœurs par nœud. À notre connaissance, les simulations parallèles sur un seul nœud de calcul ne donnent pas une accélération suffisamment élevée. Par conséquent, le calcul réalisé sur 24 cœurs, ce qui remplit entièrement un nœud de calcul, est choisi comme la référence pour évaluer l'accélération des simulations en parallèle. Nous utilisons respectivement 24, 48, 96, 92 et 384 cœurs pour ces calculs.

Le ratio d'accélération σ_n pour une simulation sur n cœurs est donné par :

$$\sigma_n = \frac{T_{24}}{T_n}, \quad (5.6)$$

où T_n est le temps de calcul pour n cœurs.

L'efficacité parallèle ϵ_n est définie par :

$$\epsilon_n = \frac{24}{n} \sigma_n. \quad (5.7)$$

5.3.3 Résultats numériques

5.3.3.1 L'effet du schéma numérique

La Figure 5.3 montre la carte de saturation du CO_2 après 20 ans d'injection pour les deux schémas numérique implicite (a) et IMPES (b) sur un maillage de type ALUGrid. L'effet de gravité est facilement observé : le CO_2 , plus léger que la saumure environnante, tends à monter vers le haut pour ensuite s'étaler horizontalement en haut du réservoir. Noter que l'étalement du CO_2 à cet endroit pourrait conduire à des risques de fuite à travers des failles non-détectées sur les couches imperméables supérieures.

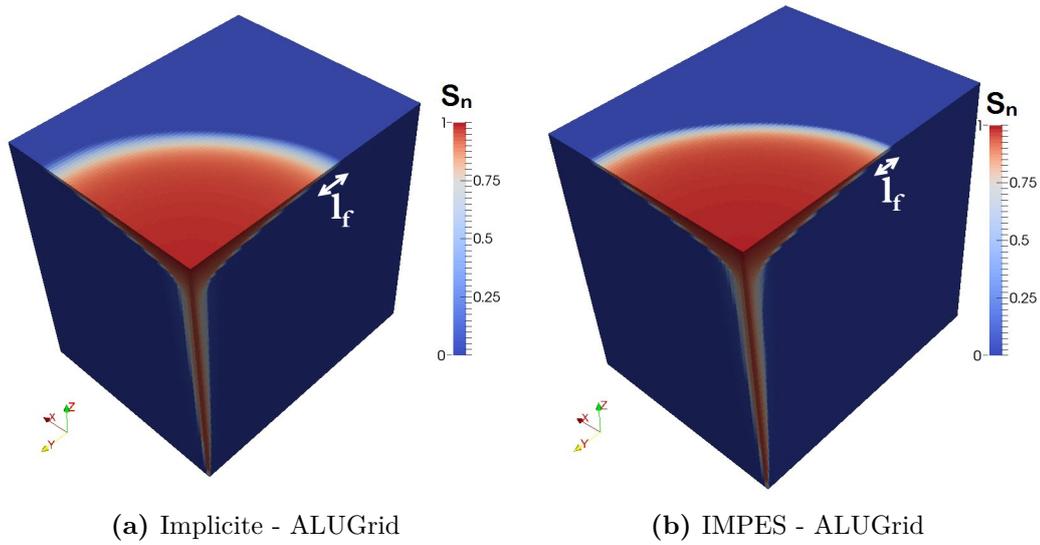


Figure 5.3 – Carte de saturation de CO₂ après 20 ans d’injection pour les simulations utilisant le schéma implicite (a) et IMPES (b). La direction Z est multipliée par un facteur de 50.

En comparant les deux Figures 5.3a et 5.3b, on voit bien que les profils de saturation calculés par chacun des deux schémas sont quasiment similaires. Cependant, on constate que la largeur du front de saturation au top du réservoir l_f dans le schéma implicite est plus grande que celle dans le schéma IMPES. Cela montre que la méthode IMPES conduit à moins de dispersion numérique que la méthode implicite, ce qui peut être expliqué par les pas de temps plus faibles dans le schéma IMPES (Young *et al.*, 1993).

Malgré son gain de précision, le schéma IMPES ne montre sa sur-performance par rapport au schéma implicite que pour de petits maillages (en général $< 10^5$ éléments). Dans le cas où le maillage est très gros, comme le notre, le schéma IMPES exige beaucoup plus de pas de temps et le temps de calcul des simulations utilisant IMPES est considérablement plus important que celui utilisant le schéma implicite (voir tableau 5.2). En outre, ce tableau montre pour les deux schémas la stabilité du nombre de pas de temps lorsque le nombre de processeurs croît : plus de soixante-dix pour le schéma implicite et plus de six mille pour le schéma IMPES. Cela montre que ces deux schémas numériques fonctionnent correctement en parallèle.

Les résultats en terme d’accélération sont présentés dans la Figure 5.4. Les deux schémas montrent une accélération relativement linéaire jusqu’à 96 cœurs. Pour un nombre de processeurs plus grand, l’efficacité parallèle du code diminue drastiquement, par exemple $\epsilon_{384} \approx 0,32$ pour le schéma implicite et $\epsilon_{384} \approx 0,27$ pour le schéma IMPES (Figure 5.5). On aurait espéré de meilleurs chiffres, car même avec 384 processeurs, on a toujours plus de 5 000 degrés de liberté par cœur, ce qui devrait être suffisant pour que le temps de calcul soit plus important que le temps de communication inter-processeurs.

Le résultat du schéma IMPES est le plus décevant car d’autres codes/ outils utilisant cet algorithme pour simuler l’écoulement multiphasique en milieu poreux montrent que le ratio d’efficacité parallèle peut dépasser 1 (voir par exemple Horgue *et al.* (2015)). Ce

	Implicit-ALUGrid		IMPES-ALUGrid	
	Temps de calcul [s]	Nombre de pas de temps	Temps de calcul [s]	Nombre de pas de temps
24 cœurs	4587,27	76	26655,2	6037
48 cœurs	2503,85	73	14765,7	6037
96 cœurs	1296,53	76	11156,3	6037
192 cœurs	1116,46	73	8358,32	6037
384 cœurs	923,626	73	6283,65	6037

Tableau 5.2 – Temps de calcul et nombre de pas de temps pour deux schémas numérique : implicite et IMPES.

résultat est néanmoins indicatif car il est très discutable de comparer l'efficacité de deux codes différents sur deux infrastructures différentes. Nous espérons que l'optimisation du paramétrage du solveur linéaire pourrait améliorer l'efficacité parallèle globale. Cet objectif requiert un travail approfondi qui ne rentre pas dans le cadre de cette thèse.

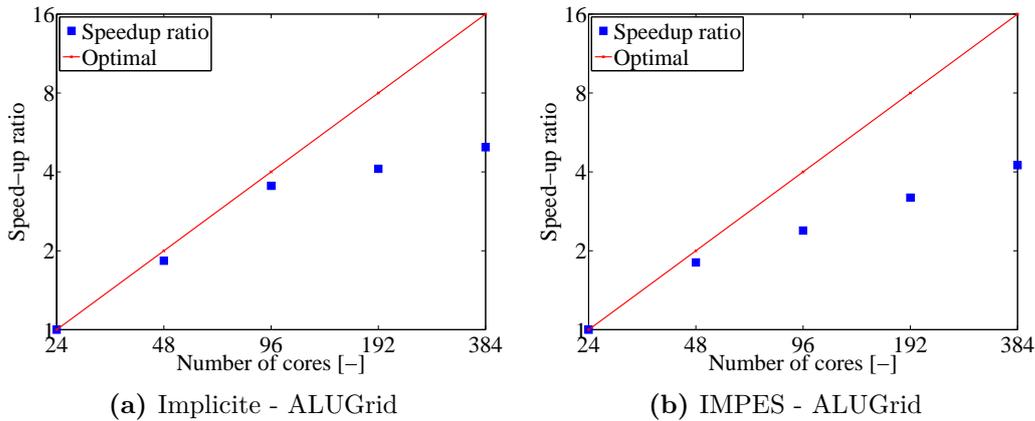


Figure 5.4 – Représentation log-log de l'accélération pour le cas implicite - ALUGrid(a) et IMPES - ALUGrid (b).

5.3.3.2 L'effet du maillage

La Figure 5.6 montre, pour la simulation sur 24 cœurs, la décomposition de domaines pour deux types de maillages : YaspGrid(a) et ALUGrid (b). On voit bien que la décomposition de domaines avec YaspGrid prend en compte la forme du milieu global en le divisant en plusieurs sous-domaines parallélépipédiques approximativement égaux. Au contraire, le maillage d'ALUGrid est décomposé de façons aléatoire. Pour assurer une bonne répartition de la charge, le rapport entre les nombres d'éléments dans le sous-domaine plus gros et celui plus petit est contrôlé par un nombre modifiable par l'utilisateur du code. Pour nos cas test, ce chiffre est égal à 1,2.

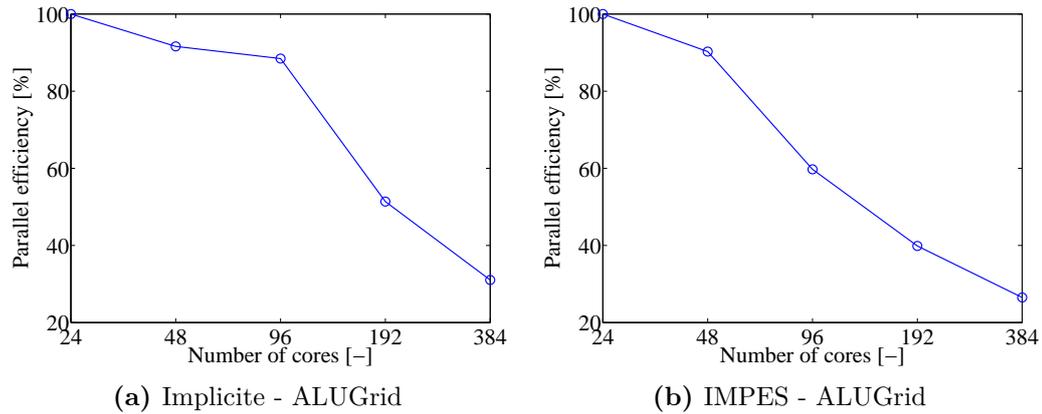


Figure 5.5 – Efficacité parallèle pour le cas implicite - ALUGrid(a) et IMPES - ALUGrid (b).

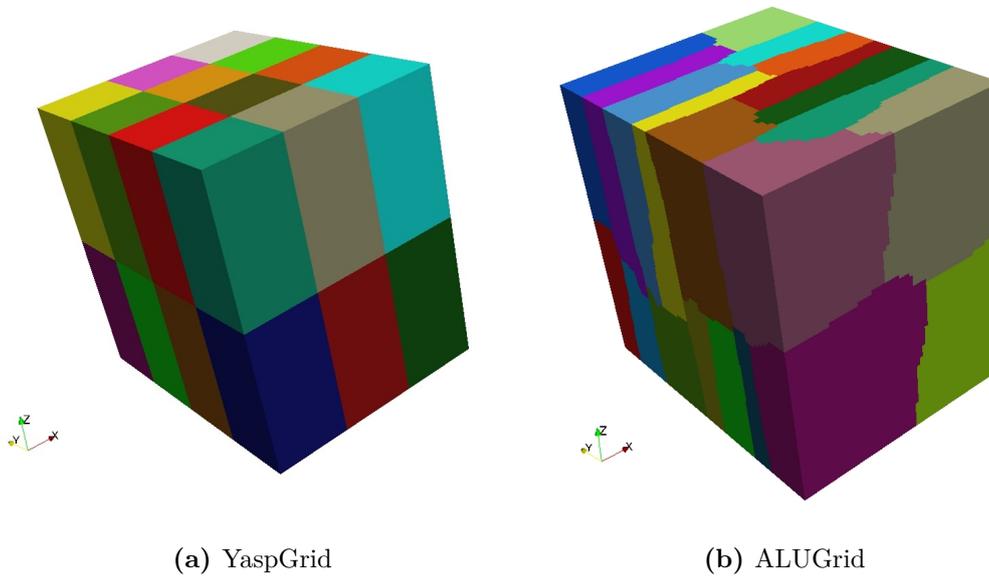


Figure 5.6 – Décomposition de domaines pour la simulation sur 24 cœurs avec YaspGrid (a) et ALUGrid (b).

Le tableau 5.3 présente une comparaison des temps de calcul et du nombre de pas de temps pour les cas Implicite–ALUGrid et Implicite–YaspGrid. On trouve que les simulations dans le cas Implicite - YaspGrid sont plus rapides pour 24 cœurs et 48 cœurs, et plus lentes pour un nombre de processeurs plus grand que celles effectuées pour le cas Implicite–ALUGrid.

Regardons maintenant le diagramme du ratio d'accélération et l'efficacité parallèle pour le cas Implicite - YaspGrid (Figure 5.7). Dans cette Figure, on voit que l'accélération est non-linéaire dès le début ($n \leq 96$ cœurs). Le ratio d'efficacité ϵ_{384} est seulement de 25% environ. En comparant avec la valeur $\epsilon_{384} = 32\%$ pour le cas Implicite - ALUGrid, on peut conclure que le maillage d'ALUGrid est plus efficace que celui d'YaspGrid pour

des simulations massivement parallèles.

	Implicit-YaspGrid		Implicit-ALUGrid	
	Temps de calcul [s]	Nombre de pas de temps	Temps de calcul [s]	Nombre de pas de temps
24 cores	3934,94	76	4587,27	73
48 cores	2175,51	73	2503,85	73
96 cores	1668,16	76	1296,53	73
192 cores	1169,24	73	1116,46	79
384 cores	981,37	73	923,626	75

Tableau 5.3 – Comparaison entre temps de calcul et nombres de pas de temps pour les cas Implicite-ALUGrid et Implicite-YaspGrid.

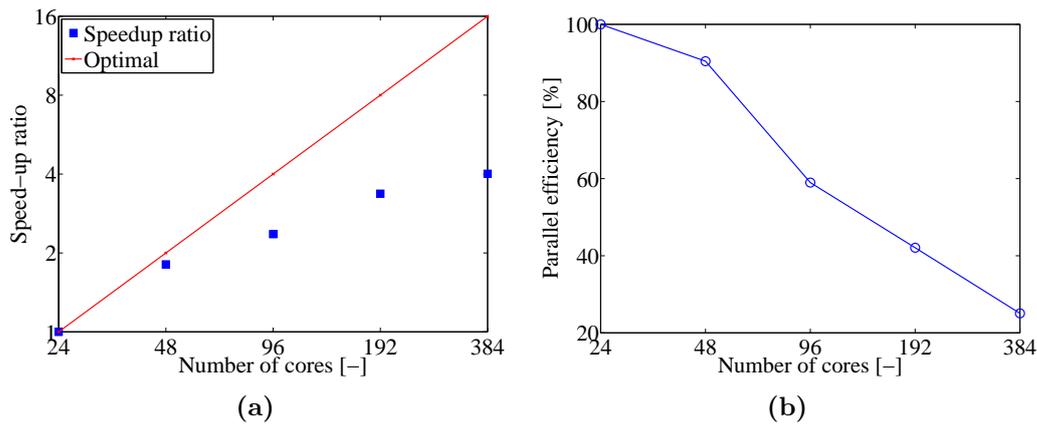


Figure 5.7 – Réprésentation log-log de l'accélération (a) et efficacité parallèle (b) pour le cas Implicite - YaspGrid.

5.3.4 Discussion

Bien que les résultats de ces simulations numériques ne montrent pas de résultats tout à fait satisfaisants en terme d'efficacité parallèle, la capacité de simuler par calcul en parallèle l'injection et la migration de CO_2 dans un réservoir tridimensionnel est néanmoins démontrée. Cette étude nous permet de choisir les meilleures options pour optimiser l'accélération des calculs en parallèle : le schéma implicite avec ALUGrid pour le maillage. Nous n'avons pas étudié l'effet des différents solveurs linéaires sur l'efficacité parallèle du code. Cependant, la Figure 5.14 dans l'appendice 5.7 montre une stabilisation du nombre d'itérations linéaire avec un nombre de processeur croissant, ce qui montre que AMG-BackEnd est un solveur efficace pour des simulations en parallèle.

5.4 Injection de CO₂ dans un réservoir hétérogène tridimensionnel

La capacité de parallélisation du code nous convainc de son utilité pour l'étude numérique de différents scénarios de stockage de CO₂ à long terme dans un milieu hétérogène tridimensionnel. Le milieu étudié est de dimension variant de quelques kilomètres jusqu'à quelques dizaines de kilomètres. Différents types d'hétérogénéité sont étudiés : milieux périodiques, milieux fluviaux et milieu réservoir SPE 10. Pour les cas tests dans les deux premiers milieux, l'écoulement est supposé être incompressible et immiscible. Nous regardons, dans la dernière configuration, un problème physique plus compliqué en simulant l'écoulement compressible et miscible dans un milieu réservoir fortement hétérogène SPE 10. Dans toutes ces simulations, la capillarité est négligée par souci de simplicité.

5.4.1 Milieux périodiques

5.4.1.1 Présentation du cas test

Cette étude a pour objectif de montrer la possibilité de simuler l'injection et la migration de CO₂ dans un système des strates périodiques initialement saturé en saumure. Le milieu étudié dans ce cas test représente l'extension en trois dimensions du milieu étudié dans les chapitres précédents. L'écoulement diphasique est supposé être incompressible. Tous les paramètres des fluides sont identiques à ceux utilisés pour les cas tests de performance du 5.3.1.

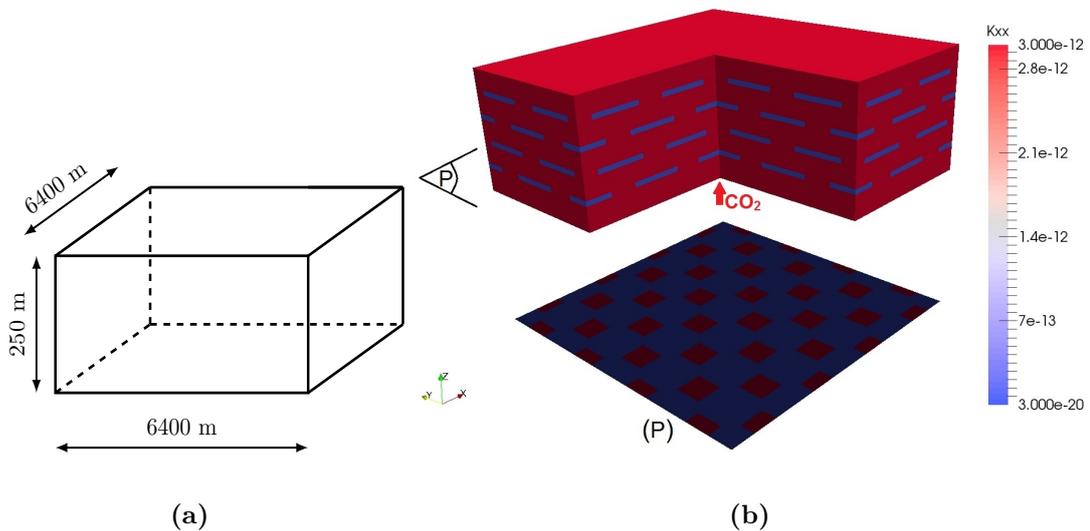


Figure 5.8 – Milieu à strates périodiques : Dimension (a) et champs de perméabilité (b). La hauteur du milieu dans la Figure (b) est multiplié par un facteur 10. La surface (P) montre la forme d'une strate typique.

Le milieu étudié est un domaine cartésien de dimension $6400 \text{ m} \times 6400 \text{ m} \times 250 \text{ m}$

qui consiste en quatre strates horizontales (Figure 5.8). Ces strates sont décalées horizontalement, l'une par rapport à l'autre, pour éliminer les chenaux verticaux favorisant la montée très rapide du CO₂. Le milieu étant isotrope, la perméabilité de la matrice équivaut à $k^m = 3 \times 10^{-12}$ m² tandis que l'inclusion est supposé être imperméable (Figure 5.8b). La porosité demeure constante dans tout le domaine, $\phi = 0,35$. On suppose également que le milieu représente un aquifère confiné, les bords horizontaux du domaine sont donc imperméables. Une condition aux limites de type Dirichlet de pression hydrostatique est prescrite sur les bords latéraux. Le CO₂ est injecté avec un débit de 45 kg/s (1,42 Mt/an) durant 50 années du bas du puits injecteur qui se trouve au centre du réservoir ($X = 3200$ m et $Y = 3200$ m).

Le maillage est constitué de $160 \times 160 \times 50$ (1 280 000) mailles pour toutes les simulations. La taille d'une maille est donc de 40 m \times 40 m \times 5 m. Les simulations, réalisées sur 24 nœuds de calcul, durent quelques heures.

5.4.1.2 Résultats numériques

Les panaches de CO₂ sont visualisées dans la Figure 5.9. On peut observer facilement la stratification du CO₂ sous les inclusions avec une forte saturation (en rouge). Après environ 10 ans d'injection, le CO₂ arrive au bord supérieur imperméable du domaine sous lequel le CO₂ commence à s'accumuler et s'étaler horizontalement. Le rayon d'extension horizontale maximale du panache de CO₂ excède 2,5 km après 30 ans (Figure 5.9b) et 2,8 km après 50 ans d'injection (Figure 5.9c).

5.4.2 Milieux fluviatiles

5.4.2.1 Présentation du cas test

Dans ce paragraphe, nous montrons quelques résultats sur la simulation de l'injection et de la migration du CO₂ dans un aquifère fluvatile. Le milieu étudié est un modèle géologique conceptuel de dimension 1000 m \times 1000 m \times 250 m (Figure 5.10a), qui est discrétisé en un maillage de $100 \times 100 \times 100$ (1.E+6) mailles. Ce milieu se compose d'une matrice peu perméable, ici appelé l'encaissant, et de 20 chenaux horizontaux perméables orientés suivant l'axe Y. La largeur des chenaux varie entre 250 m et 300 m, tandis que la hauteur maximale est de 75 m. Le milieu est supposé être isotrope. La perméabilité et la porosité de l'encaissant et des chenaux sont résumées dans le tableau 5.4.

	Encaissant	Chenaux
Perméabilité [m ²]	3×10^{-18}	3×10^{-12}
Porosité [-]	0,40	0,20

Tableau 5.4 – Paramètres pétrophysiques de l'encaissant et des chenaux.

Un seul puits injecteur est localisé au milieu du domaine ($X = 500$ m et $Y = 500$ m). Le CO₂ est injecté uniquement dans les couches perméables avec un débit constant de

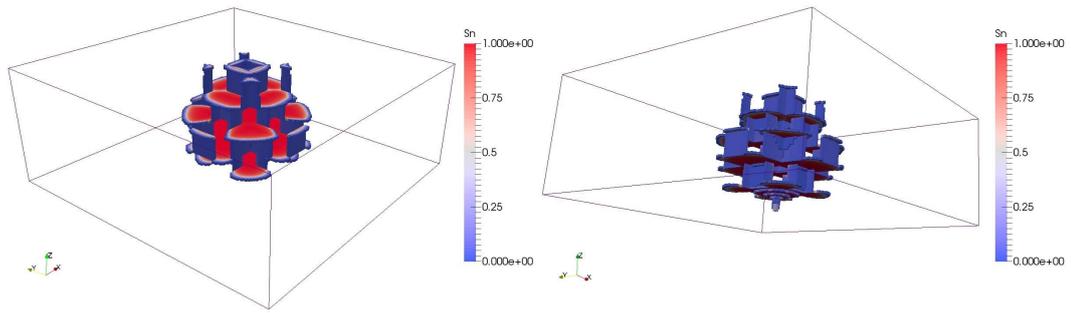
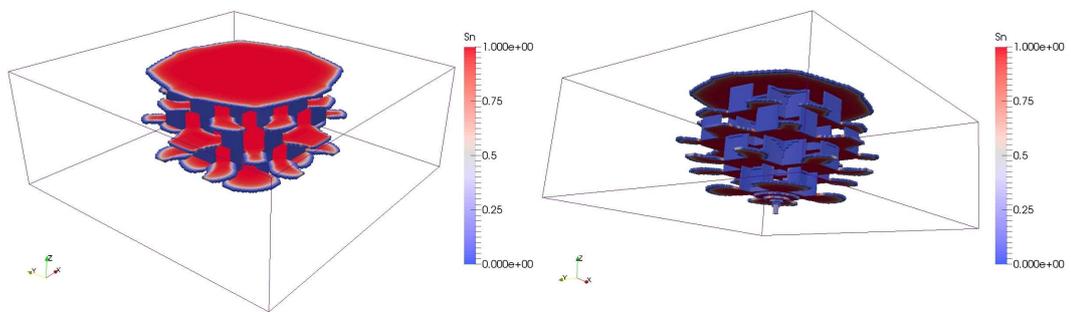
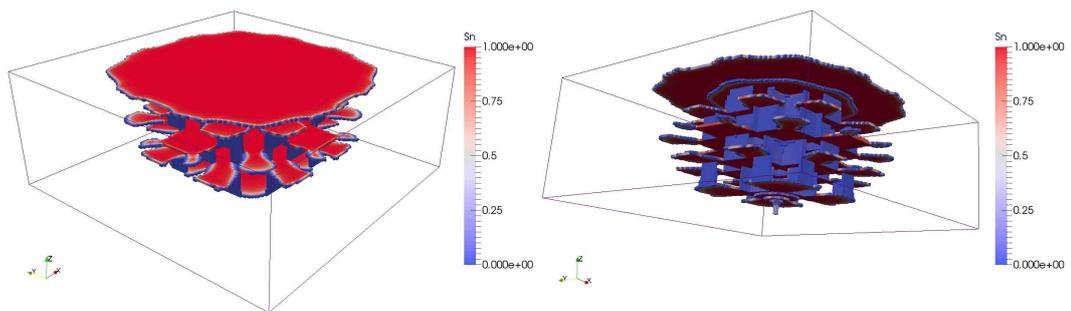
(a) $t = 10$ ans(b) $t = 30$ ans(c) $t = 50$ ans

Figure 5.9 – Saturation du CO_2 injecté dans le milieu à strates périodiques au temps $t = 10$ ans (Figure a, première rangée), $t = 30$ ans (Figure b, deuxième rangée) et $t = 50$ ans (Figure c, troisième rangée). Le milieu est bordé par l'hexaèdre.

15 kg/s (0.4734 Mt/an) durant 1 ans (voir la Figure 5.10b). La pression sur les surfaces perpendiculaires à la direction d'écoulement fluvial ($Y = 0$ m et $Y = 1000$ m) est égale à la pression hydrostatique initiale. Les autres surfaces sont imperméables.

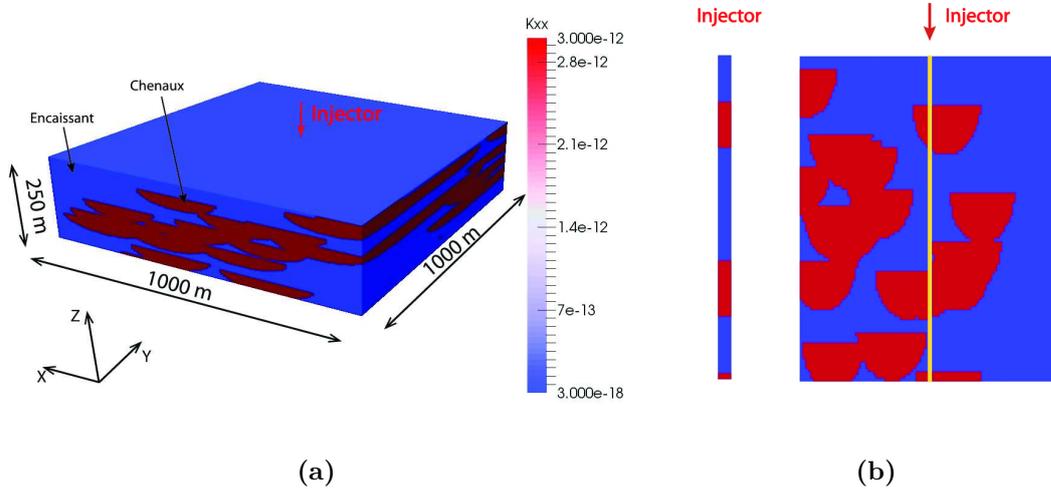


Figure 5.10 – Milieu fluvatile 3D : La dimension du milieu (a) et une coupe à la surface $Y = 500$ m passant à travers le puits injecteur (b).

Le calcul sur 24 processeurs dure seulement quelques heures.

5.4.2.2 Résultats numériques

D'après l'évolution du panache de CO_2 illustré en Figure 5.11, on constate que le CO_2 circule notamment dans les chenaux. Néanmoins, une partie de CO_2 franchit l'interface entre l'encaissant et les chenaux et pénètre dans l'encaissant. Cela se traduit par la couleur bleu dominante dans la Figure 5.11c, ce qui indique de faible saturation dans l'encaissant. Les simulations indiquent également deux zones de piégeage séparées (Figure 5.11b et 5.11d). Après un an d'injection, le CO_2 , en suivant les chenaux, est arrivé aux surfaces $Y = 0$ et $Y = 1000$ m à travers lesquelles il peut s'échapper du domaine.

5.4.3 Réservoir SPE10

5.4.3.1 Présentation du cas test

Nous étudions dans cette dernière configuration la dissolution du CO_2 dans le cas d'un problème *compressible* et *miscible* du mélange diphasique CO_2 et saumure (modèle 2p2c) dans le milieu réservoir hétérogène SPE 10. Les champs de perméabilité et de porosité du modèle SPE 10 original sont présentés dans la Figure 5.12.

La configuration de ce cas test est inspirée du travail de Yamamoto *et al.* (2013). L'injection de CO_2 est effectuée avec un débit de 12,367 kg/s (0,39 Mt/an) à travers un puits injecteur se trouvant à un coin du domaine en $X = 0$ m et $Y = 8800$ m. Au coin opposé ($X = 6400$ m et $Y = 0$ m), la saumure environnante est pompée avec un débit de 18,290

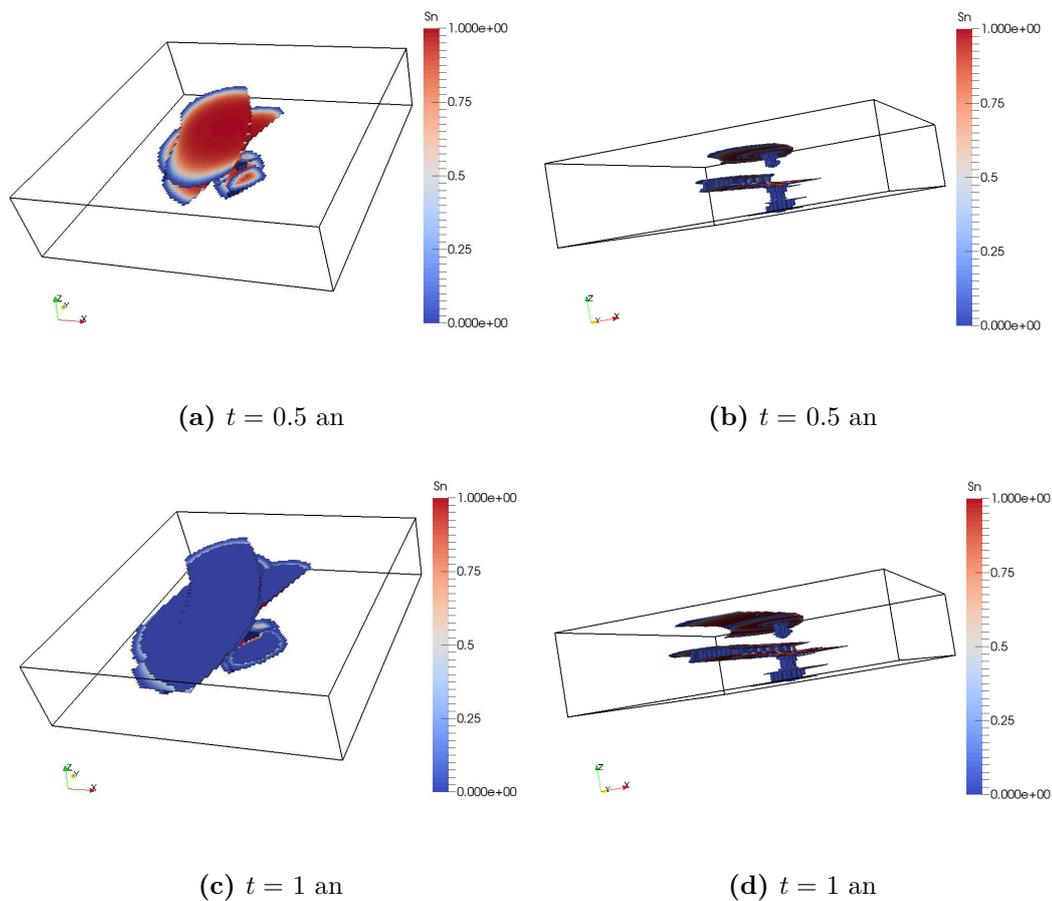


Figure 5.11 – Évolution du panache de CO₂ dans le milieu fluvial 3D vu de dessus (à gauche) et de dessous (à droite).

kg/s (0,58 Mt/an). La salinité de la saumure est supposé être égale à 0. Tous les bords sont imperméables aux deux fluides. Le milieu est initialement saturé en saumure et la pression de l'eau initiale suit une loi hydrostatique.

En outre, afin d'évaluer l'effet d'hétérogénéité sur la migration du CO₂, une simulation d'injection de CO₂ avec la même configuration mais dans un milieu homogène équivalent, dont la perméabilité et la porosité sont déterminées comme dans le cas test de mesure des performances du paragraphe 5.3.1, est également effectuée. Les résultats de ces deux calculs, à savoir dans le modèle SPE 10 original et dans le milieu homogène équivalent, sont comparés entre eux.

5.4.3.2 Résultats numériques

La complexité du problème conduit à un temps de calcul en parallèle déraisonnable (\sim des semaines, voire des mois). Au moment de la rédaction du manuscrit, nous n'avons obtenu que des résultats préliminaires. La Figure 5.13, représente le panache de CO₂

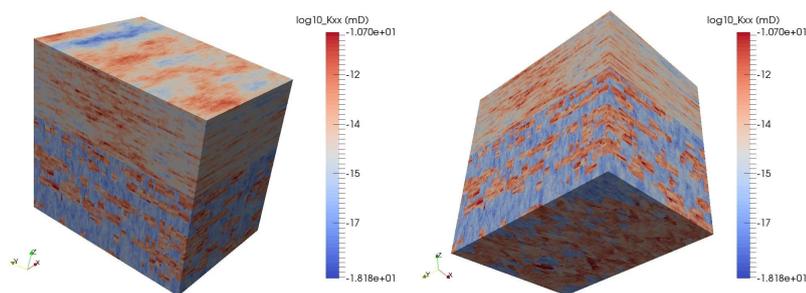
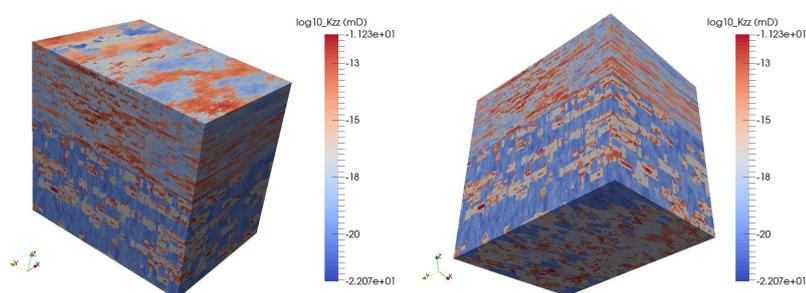
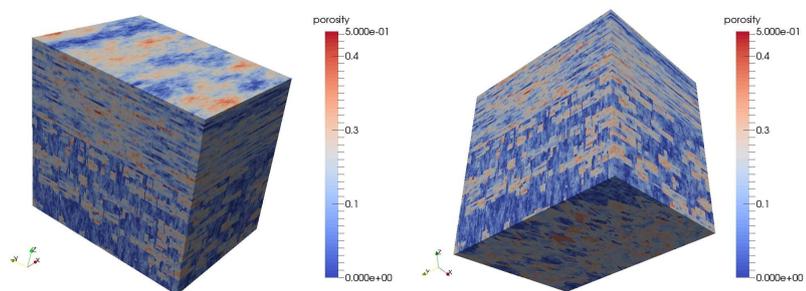
(a) Perméabilité horizontale k_{xx} & k_{yy} (b) Perméabilité verticale k_{zz} (c) Porosité ϕ

Figure 5.12 – Champs de perméabilité et de porosité du milieu réservoir SPE 10 vu de dessus (à gauche) et de dessous (à droite). La hauteur du milieu est multiplié par un facteur de 50.

après 5 ans d'injection. On peut constater l'étalement horizontal du CO_2 dans le cas du milieu homogène notamment sous le bord supérieur du domaine. A l'inverse, dans le milieu hétérogène, le CO_2 tend à migrer en suivant des chemins de haute perméabilité, ce qui disperse le panache aux alentours du puits d'injection. Il est indubitable que la présence de chemins tortueux augmente la quantité de CO_2 en contact avec la saumure environnante, et par conséquent accroît d'environ 20% la fraction de CO_2 dissout dans la saumure.

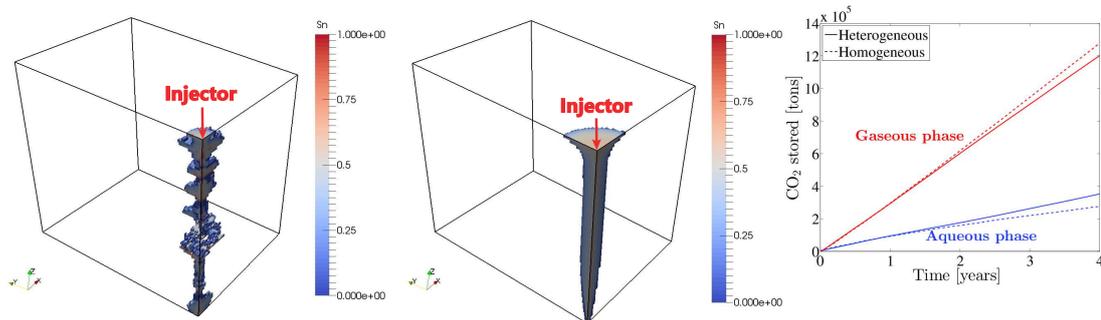


Figure 5.13 – Le panache de CO₂ après 5 ans d’injection dans le milieu réservoir SPE 10 hétérogène (à gauche) et dans le milieu homogène équivalent (au milieu). La sous-figure à droite montre l’évolution temporelle du CO₂ piégé sous forme gazeuse (CO₂ supercritique) et aqueuse (CO₂ dissout dans la saumure). La direction Z est multipliée par un facteur de 50.

5.5 Conclusion et perspectives

Une étude prospective de l’écoulement de CO₂ dans différents types de milieu tridimensionnel a été effectuée à l’aide du code DuMu^x. L’étude des performances du code montre que l’efficacité du parallélisme est à améliorer. La version parallèle, permet d’économiser de façon notable du temps de calcul, notamment sur des cas simplifiés. Néanmoins, le temps de calcul des simulations de problèmes complexes, tel que ceux utilisant le modèle 2p2c sans ou avec capillarité, sous condition non-isothermique ..., est colossal. Cela souligne, encore une fois, la nécessité des modèles mis à l’échelle pour prédire, même qualitativement, l’évolution du CO₂ injecté dans un réservoir géologique.

5.6 Appendice - Panorama des codes utilisés pour la séquestration géologique de CO₂

Tableau 5.5 – Panorama des codes utilisés pour la séquestration géologique de CO₂

Codes	Développeur (s)	Applications	Caractéristiques (méthode de numérisation/intégration) numériques discrétisation
ATHENA /AC-CRETE	Université de Bergen (Norvège)	3D écoulement multiphasique, transfert thermique, transport réactive	Méthode des volumes finis (MVF), réaction et écoulement itérativement couplé.
COORES	IFPEN, France	Écoulement 3D, 3-phase et à plusieurs composants dans les milieux poreux hétérogène	MVF pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite
DUMUX	Université de Stuttgart, Allemagne	Logiciel multi-échelle multi-physique pour la simulation d'écoulement et transport dans les milieux poreux	MVF pour la discrétisation spatiale, IMPES (implicite en pression, explicite en saturation)...
ECLIPSE 100/300	Schlumberger, États-Unis & France	Écoulement 3-phase et 3D dans les milieux poreux avec les équations d'état (EOS)cubique, pression dépendant de la perméabilité...	Méthode des différences finies intégrées (MDFI) avec la discrétisation spatiale irrégulière, discrétisation temporelle implicite, IMPES (implicite en pression, explicite en saturation)...
FEFLOW	DHI-WASY GmbH, Allemagne	Résolution des équation d'écoulement subsurface avec transfert de masse et de chaleur, y compris la cinétique chimique de plusieurs composants	Méthode des éléments finis (MEF) pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite / explicite/ Crank-Nicolson
FEHM	LANL, États-Unis	Résolution des équations de masse, de chaleur et d'équilibre couplées des écoulements multiphasiques non-isothermes dans les milieux poreux	MVF pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite
GEM	CMG, Canada	Simulateur de réservoir des équations d'état (EOS)	MDFI pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite
IPARS	Université du Texas à Austin, États-Unis	Calcul en parallèle, approche multi-physique pour l'écoulement multiphasique dans les milieux poreux	Méthode d'éléments finis mixtes pour la discrétisation spatiale; algorithme IMPEC (implicite en pression, explicite en concentration) pour la discrétisation temporelle
MIN3P	UCB, Canada	Modélisation du transport réactive à plusieurs composants dans les milieux poreux variablement saturés	MVF pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite
MODFLOW	USGS, État-Unis	Résolution des équations d'écoulement subsurface dans les aquifères	MDF pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite / Crank-Nicolson
MRST	Sintef, Norvège	Solveur de l'écoulement et du transport monophasique et multiphasique, modèle de black-oil, de VE (vertical equilibrium)	MVF et MEF multi-échelle pour la discrétisation spatiale; implicite / explicite / IMPES pour la discrétisation temporelle
PHAST	USGS, État-Unis	Simulation d'écoulement subsurface, transport des solubles et des réactions géochimiques multi-composant	MDF pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite / Crank-Nicolson
RTAFF2	BRGM, France	Écoulement multiphasique, multi-composant, non-isotherme 2D/3D dans les milieux poreux	MVF pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite
TOUGHREACT + TOUGH2	LBL, États-Unis	Écoulement multiphasique, chimiquement réactive non-isotherme à plusieurs composants dans milieux poreux et milieux fracturés	MDFI pour la discrétisation spatiale; discrétisation temporelle implicite

5.7 Appendice - Variation du nombre d'itérations pour le cas Implicite - ALUGrid - 2p

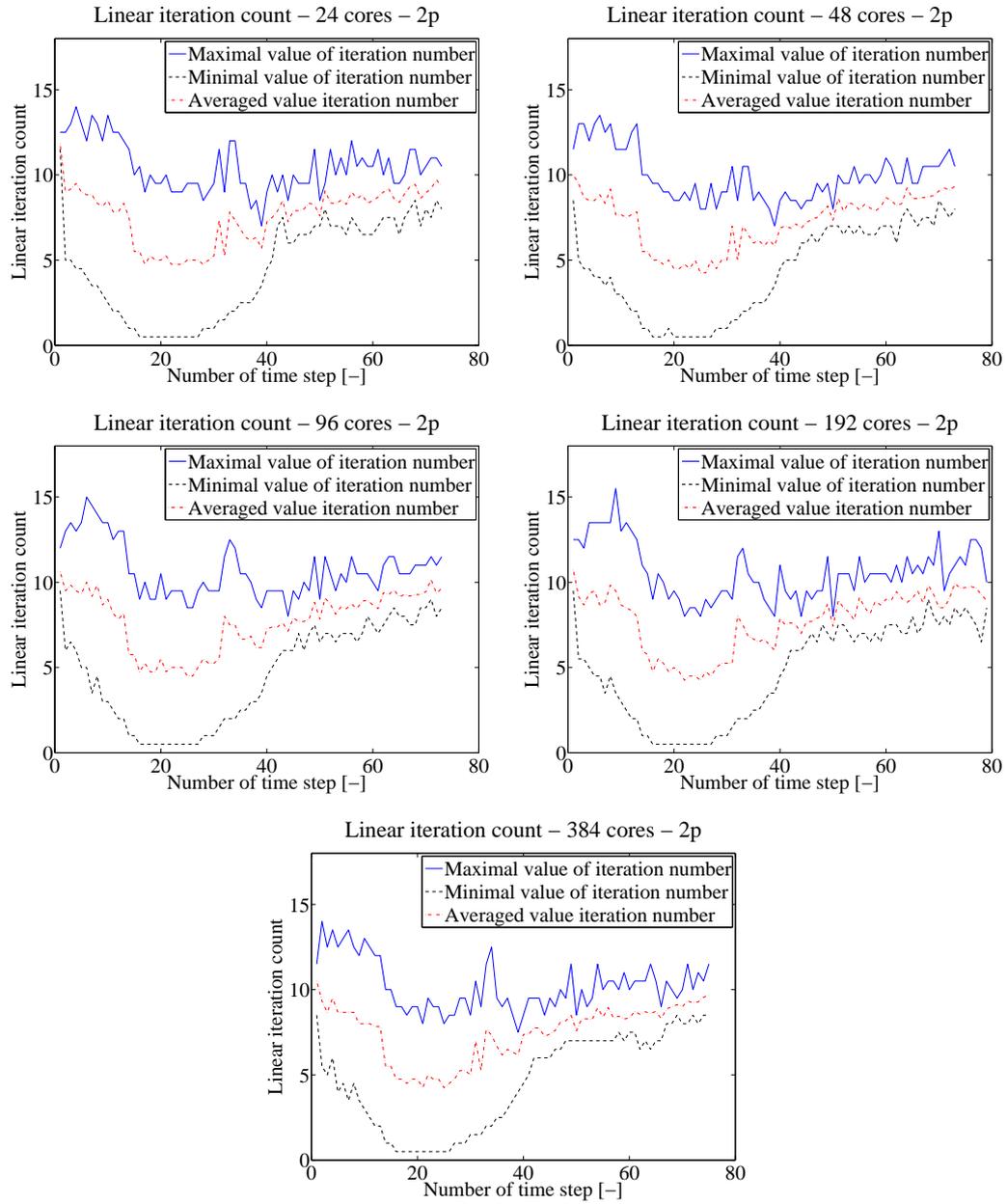


Figure 5.14 – Le nombre d'itération maximal, minimal et moyen pour chaque pas de temps des simulations du cas Implicite - ALUGrid. Ces courbes restent quasiment inchangées quand le nombre de processeur augmente.

Bibliographie

- AAVATSMARK, I. (2002). An introduction to multipoint flux approximations for quadrilateral grids. *Computational Geosciences*, 6(3-4):405–432.
- AAVATSMARK, I. (2007). Interpretation of a two-point flux stencil for skew parallelogram grids. *Computational geosciences*, 11(3):199–206.
- AAVATSMARK, I., BARKVE, T., BØE, Ø. et MANNSETH, T. (1994). Discretization on non-orthogonal, curvilinear grids for multi-phase flow. In *4th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery*.
- AAVATSMARK, I., BARKVE, T., BØE, Ø. et MANNSETH, T. (1996). Discretization on non-orthogonal, quadrilateral grids for inhomogeneous, anisotropic media. *Journal of computational physics*, 127(1):2–14.
- AZIZ, K. et SETTARI, A. (1979). *Petroleum reservoir simulation*. Chapman & Hall.
- BASTIAN, P., BLATT, M., DEDNER, A., ENGWER, C., KLÖFKORN, R., KORNUBER, R., OHLBERGER, M. et SANDER, O. (2008a). A generic grid interface for parallel and adaptive scientific computing. part ii : Implementation and tests in dune. *Computing*, 82(2-3):121–138.
- BASTIAN, P., BLATT, M., DEDNER, A., ENGWER, C., KLÖFKORN, R., OHLBERGER, M. et SANDER, O. (2008b). A generic grid interface for parallel and adaptive scientific computing. part i : abstract framework. *Computing*, 82(2-3):103–119.
- BUCKLEY, S. E., LEVERETT, M. *et al.* (1942). Mechanism of fluid displacement in sands. *Transactions of the AIME*, 146(01):107–116.
- CAO, Y., EIKEMO, B. et HELMIG, R. (2007). *Fractional Flow Formulation for Two-Phase Flow in Porous Media*. GRK 1398/1.
- CHAVENT, G. et JAFFRÉ, J. (1986). *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation : single phase, multiphase and multicomponent flows through porous media*. Elsevier.
- CHEN, Y. et DURLOFSKY, L. J. (2006). Adaptive local–global upscaling for general flow scenarios in heterogeneous formations. *Transport in porous Media*, 62(2):157–185.
- CHEN, Z. et EWING, R. E. (1997). Fully discrete finite element analysis of multiphase flow in groundwater hydrology. *SIAM journal on numerical analysis*, 34(6):2228–2253.
- CHEN, Z., HUAN, G. et LI, B. (2004). An improved IMPES method for two-phase flow in porous media. *Transport in porous media*, 54(3):361–376.
- CHRISTIE, M., BLUNT, M. *et al.* (2001). Tenth SPE comparative solution project : A comparison of upscaling techniques. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers.
- COATS, K. H. *et al.* (2000). A note on IMPES and some IMPES-based simulation models. *SPE Journal*, 5(03):245–251.

- DEDNER, A., FLEMISCH, B. et KLÖFKORN, R. (2012). *Advances in DUNE*. Springer.
- DEDNER, A., KLÖFKORN, R. et NOLTE, M. (2014). The DUNE-ALUGrid module. *CoRR*, abs/1407.6954.
- FLEMISCH, B., DARCIS, M., ERBERTSEDER, K., FAIGLE, B., LAUSER, A., MOSTHAF, K., MÜTHING, S., NUSKE, P., TATOMIR, A., WOLFF, M. *et al.* (2011). Dumu^x : DUNE for multi-{phase, component, scale, physics,...} flow and transport in porous media. *Advances in Water Resources*, 34(9):1102–1112.
- HORGUE, P., SOULAINÉ, C., FRANC, J., GUIBERT, R. et DEBENEST, G. (2015). An open-source toolbox for multiphase flow in porous media. *Computer Physics Communications*, 187:217–226.
- JIANG, X. (2011). A review of physical modelling and numerical simulation of long-term geological storage of CO₂. *Applied Energy*, 88(11):3557–3566.
- KARYPIS, G. et KUMAR, V. (1998). A software package for partitioning unstructured graphs, partitioning meshes, and computing fill-reducing orderings of sparse matrices. *University of Minnesota, Department of Computer Science and Engineering, Army HPC Research Center, Minneapolis, MN*.
- KARYPIS, G., SCHLOEGEL, K. et KUMAR, V. (1997). Parmetis : Parallel graph partitioning and sparse matrix ordering library. *Version 1.0, Dept. of Computer Science, University of Minnesota*.
- WARE, A., PARROTT, A. et ROGERS, C. (1995). A finite volume discretisation for porous media flows governed by non-diagonal permeability tensors. *In Proceedings of CFD95, Third Annual Conference of the CFD Society of Canada, Banff, Alberta, Canada*, pages 25–27.
- YAMAMOTO, H., NANAI, S., ZHANG, K., AUDIGANE, P., CHIABERGE, C., OGATA, R., NISHIKAWA, N., HIROKAWA, Y., SHINGU, S. et NAKAJIMA, K. (2013). High-performance Supercomputing as a Risk Evaluation Tool for Geologic Carbon Dioxide Storage. *Energy Procedia*, 37:3997–4005.
- YOUNG, L., RUSSELL, T. *et al.* (1993). Implementation of an adaptive implicit method. *In SPE Symposium on Reservoir Simulation*. Society of Petroleum Engineers.

Chapitre 6

Conclusion générale et perspectives

Les deux mots les plus brefs et les plus anciens, Oui et Non, sont ceux qui exigent le plus de réflexion.

Pythagore

Sommaire

6.1	Bilan de la thèse	152
6.2	Perspectives	154
	Bibliographie	155

6.1 Bilan de la thèse

L'objectif de cette thèse est la mise à l'échelle, de l'échelle de la cellule (appelée échelle microscopique) à l'échelle du réservoir (appelée échelle macroscopique), d'un modèle d'écoulement avec gravité et capillarité du mélange diphasique CO_2 - saumure au sein d'un milieu stratifié périodique. Le cadre théorique est la méthode d'homogénéisation basée sur le développement asymptotique à double échelle. Les paramètres effectifs du milieu homogène équivalent, tels que le flux effectif, la perméabilité absolue ainsi que la perméabilité relative effective, sont déterminés.

L'enjeu principal de ce travail est lié à la prise en compte de la gravité. Celle-ci introduit des problèmes mathématiques, quelle que soit la méthode de mise à l'échelle envisagée, car elle conduit à une ségrégation gravitaire des deux phases, ce qui s'exprime par une stratification locale de la phase légère sous les strates peu perméables. Quand l'effet de gravité est dominant, la saturation à l'ordre ε^0 , où ε désigne le rapport d'échelles, désignée par S_0 , dépend à la fois des variables macroscopiques et microscopiques. La résolution de la saturation S_0 à l'échelle microscopique devient donc complexe, et doit se faire soit numériquement soit analytiquement, ou semi-analytiquement, en appliquant des hypothèses simplificatrices. Pour cette raison les travaux de thèse se déclinent en deux grands axes : développement de modèles analytiques et simulation numérique. Le travail de simulation numérique a été mené avec le code DuMu^x développé à l'Université de Stuttgart.

Aspects théoriques

En ce qui concerne le modèle d'écoulement 1D dans un milieu périodique parfaitement stratifié, différents cas ont été étudiés, selon les valeurs du nombre capillaire N_c et du nombre gravitaire N_g . Nous nous sommes particulièrement intéressés au cas où la gravité est dominante à grande échelle ($N_c \ll 1, N_g \ll 1$). Dans ce cas, le flux mis à l'échelle ne peut être déterminé que numériquement à partir de la résolution du problème local en se basant sur l'algorithme de Mikelic *et al.* (2002). Le modèle mis à l'échelle semi-analytique a ensuite été validé par simulation numérique en comparant l'évolution temporelle de la saturation de CO_2 dans le milieu hétérogène original avec celle dans le milieu homogène équivalent pour différentes valeurs du nombre capillaire N_c et du flux incident. Le bon accord entre les résultats du modèle homogénéisé et ceux des simulations numériques montrent l'efficacité de l'approche asymptotique dans le cas unidimensionnel.

Ce travail a ensuite été étendu au cas de l'écoulement dans un milieu bi-dimensionnel périodique constitué des strates horizontales discontinues. En 2D, la résolution numérique du problème local reste aussi coûteuse en temps de calcul que la simulation du problème de l'écoulement diphasique dans le milieu complet. Nous avons donc considéré deux approches pour résoudre ce problème analytiquement (ou semi-analytiquement), soit par l'analyse en perturbation soit par l'approche des courants de gravité (GC). La première approche se limite au cas des milieux faiblement hétérogènes. À titre d'exemple, un modèle de mise à l'échelle d'un écoulement diphasique dominé par la gravité utilisant l'analyse en perturbation a été développé. Au contraire, l'approche GC est capable de traiter le problème local à petite échelle dans le cas où la perméabilité des strates et de la matrice sont très différentes. Cette approche est donc devenue notre référence théorique.

Cette approche est le seul moyen pour approximer analytiquement l'accumulation du CO_2 sous les strates imperméables ou peu perméables.

Le problème local nous a conduit à considérer un milieu constitué d'une strate isolée de longueur finie. Dans un premier temps, nous avons appliqué le modèle de Golding *et al.* (2011) pour étudier le cas d'une strate imperméable. Dans un second temps, nous avons étendu ce modèle au cas d'une strate semi-perméable, en tenant compte du terme de fuite de CO_2 à travers les strates. Les résultats obtenus avec notre modèle sur différents cas tests résolus numériquement, avec et sans capillarité, sont satisfaisants en terme de capacité d'estimation de : (i) l'épaisseur des courants de gravité sous l'interface entre la strate et la matrice; et (ii) la zone de passage du CO_2 à travers les strates lorsque la capillarité est prise en compte.

L'étape suivante a consisté à déterminer la courbe de flux mise à l'échelle à partir de la solution du problème local. Différents cas ont été considérés : du cas le plus simple, strate imperméable et sans capillarité, au cas le plus compliqué, strate semi-perméable et avec capillarité. Les courbes analytiques sont en assez bon accord avec les courbes obtenues numériquement, en particulier dans le cas d'un faible flux incident, ce qui conduit à des courants de gravité de faible épaisseur par rapport à leur largeur.

Finalement, nous avons proposé deux approches pour calculer les perméabilités relatives mises à l'échelle : une approche semi-analytique SPA et une approche *à posteriori* NURP. Les résultats de ces deux approches coïncident assez bien, notamment pour de faibles flux incidents. Par ailleurs, l'approche *à posteriori* a été validée en comparant le flux numérique obtenu avec le code DuMu^x avec le flux mis à l'échelle reconstruit à partir des courbes de perméabilité relative effective.

Aspects numériques

Bien que le but des simulations numériques réalisées dans ce travail ait été essentiellement de valider des modèles analytiques, nous avons consacré le dernier chapitre à une étude purement numérique et de nature exploratoire. Nous avons testé, dans ce chapitre, les capacités du code DuMu^x à simuler par un calcul parallèle un écoulement diphasique au sein d'un milieu tridimensionnel homogène ou hétérogène. Une étude des performances du code a été menée et nous a convaincu de la capacité de parallélisation de DuMu^x. Des simulations numériques de l'injection et la migration du CO_2 dans différents types de milieux hétérogènes (milieux périodiques, milieux fluviatiles et milieu réservoir SPE 10) ont conclu ce chapitre.

Limitations

Pour la partie théorique, la principale limitation de notre approche vient de l'hypothèse simplificatrice d'équilibre vertical de l'approche GC. Cette hypothèse n'est valable que pour des courants de gravité relativement fins, i.e. dont la hauteur est faible par rapport à l'extension longitudinale, ce qui correspond à un flux incident relativement faible.

De plus, l'approche GC n'est pas capable de décrire la transition de régime d'écoulement

du CO₂, du transport dans les courants de gravité qui sont macroscopiquement déconnectés au transport dans des chenaux connectés quand le CO₂ envahit la micro-structure.

6.2 Perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont ouvert des perspectives pour une analyse approfondie de certaines questions scientifiques. Nous abordons ici uniquement les questions relatives au problème de l'écoulement immiscible et incompressible dans un milieu stratifié périodique.

Dispersion

Bien que la macro-dispersion de l'écoulement multiphasique immiscible et incompressible en milieu aléatoire fasse déjà l'objet de plusieurs études (Langlo et Espedal, 1994; Bolster *et al.*, 2009, 2011), celle-ci a rarement été étudiée en milieu stratifié périodique. Un résultat préliminaire dans le cas où l'injection est dominante est donné en annexe. Le calcul de la dispersion lorsque l'écoulement est dominé par la gravité reste à développer.

Extension horizontale du CO₂ après injection

Dans le cas 2D, pour que la théorie d'homogénéisation puisse s'appliquer simplement, nous avons supposé que la condition aux limites du problème est de type 1D : saturation constante ou vitesse d'injection constante tout le long du bord inférieur du domaine. Cette hypothèse conduit à un problème homogénéisé 1D. Elle peut être relâchée en considérant un terme source ponctuel, par exemple un seul puits d'injection de CO₂ en bas du domaine. Cette configuration conduit à considérer un autre facteur important en terme de stockage : l'extension horizontale du CO₂ après injection. Un tel problème dans un milieu périodique multistrates négligeant la capillarité a été étudié par Hesse et Woods (2010) en utilisant l'approche GC. La capillarité pourrait être prise en compte sans difficultés majeures supplémentaires.

Modèle GC en 3D

En ce qui concerne les milieux tridimensionnels constitués de strates périodiques, l'effort devrait s'orienter vers l'extension de l'approche des courants de gravité en 3D. En l'absence de capillarité, l'accumulation du CO₂ en dessous d'une barrière imperméable peut être approximée à l'aide de l'hypothèse de Dupuit (voir par exemple Green et Ennis-King (2013) pour le cas de barrières elliptiques). De façon similaire au cas 2D, le modèle GC en 3D pourrait être étendu en considérant des barrières perméables et en prenant en compte la capillarité.

Bibliographie

- BOLSTER, D., DENTZ, M. et CARRERA, J. (2009). Effective two-phase flow in heterogeneous media under temporal pressure fluctuations. *Water resources research*, 45(5).
- BOLSTER, D., NEUWEILER, I., DENTZ, M. et CARRERA, J. (2011). The impact of buoyancy on front spreading in heterogeneous porous media in two-phase immiscible flow. *Water Resources Research*, 47(2).
- GOLDING, M. J., NEUFELD, J. A., HESSE, M. A. et HUPPERT, H. E. (2011). Two-phase gravity currents in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 678:248–270.
- GREEN, C. P. et ENNIS-KING, J. (2013). Residual trapping beneath impermeable barriers during buoyant migration of CO₂. *Transport in porous media*, 98(3):505–524.
- HESSE, M. et WOODS, A. (2010). Buoyant dispersal of CO₂ during geological storage. *Geophysical Research Letters*, 37(1).
- LANGLO, P. et ESPEDAL, M. S. (1994). Macrodispersion for two-phase, immiscible flow in porous media. *Advances in Water Resources*, 17(5):297 – 316.
- MIKELIC, A., van DUIJN, C. et POP, I. (2002). Effective equations for two-phase flow with trapping on the micro scale. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 62(5):1531–1568.

Appendices

Préambule

Les travaux présentés ici ne visent pas à la construction d'un nouveau modèle d'écoulement mis à l'échelle, mais à présenter différentes techniques permettant de traiter des régimes d'écoulement variés et pour différents types de milieu.

Au cours de la recherche d'un guide théorique approprié pour la mise à l'échelle d'un modèle d'écoulement du CO_2 avec gravité dans un milieu stratifié périodique, plusieurs techniques ont été étudiées et testées. Parmi elles, la méthode d'homogénéisation basée sur le développement asymptotique à double échelle, que nous présentons ci-après, est une méthode puissante.

La méthode d'homogénéisation est utilisée et validée dans certains cas d'écoulement diphasique, notamment lorsque l'effet de gravité est négligé. Seuls Panfilov et Floriat (2004) et plus récemment Szymkiewicz *et al.* (2011) ont pris en compte la gravité. Néanmoins, dans ces travaux, la force dominante est soit la capillarité (Szymkiewicz *et al.*, 2011), soit la viscosité (injection) (Panfilov et Floriat, 2004).

Nous présentons tout d'abord dans l'annexe A le cas de l'injection dominante sans capillarité, cas similaire au travail de (Panfilov et Floriat, 2004). Néanmoins, dans cet article, les auteurs semblent avoir commis une approximation non justifiée en supposant que la saturation à l'ordre zéro ne dépend que des variables microscopiques. Nous avons montré que cette approximation n'est vérifiée que lorsque l'effet de la gravité est faible devant la force de viscosité. Nous avons proposé un modèle mis à l'échelle corrigeant celui de Panfilov et Floriat (2004). Ce modèle a ensuite été validé par simulation numérique.

L'annexe B est dédiée au cas de la gravité dominante. Quand l'effet de gravité est prépondérant, la saturation S_0 à l'ordre zéro de la séparation d'échelles doit être considérée comme une fonction des variables macroscopiques ainsi que microscopiques. Une analyse en perturbations est effectuée pour déterminer S_0 à l'échelle de la cellule, en supposant que le milieu est faiblement hétérogène. Cette analyse ne permet donc pas de rendre compte de la stratification sous des inclusions imperméables ou faiblement perméables. Ce modèle théorique est validé par de simulations numériques réalisées avec le code DuMu^x. Malgré sa limite de validité, l'analyse en perturbations fournit un support théorique permettant de mieux comprendre les phénomènes physiques.

Annexe **A**

Modèle mis à l'échelle, cas de l'injection dominante sans capillarité

La théorie, c'est que on sait tout et que rien ne fonctionne. La pratique, c'est que tout fonctionne et que personne ne sait pourquoi. Ici, nous avons réuni théorie et pratique : Rien ne fonctionne... et personne ne sait pourquoi!

Albert Einstein

Sommaire

A.1	Modèle analytique	162
A.2	Validation du modèle	167
A.3	Conclusion	172

A.1 Modèle analytique

Considérons le cas d'une injection dominante. Pour adimensionner les équations, le flux d'injection est choisi comme la quantité caractéristique du flux. Les variables adimensionnées sont donc :

$$\hat{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}}{H}, \hat{k} = \frac{k}{k_0}, \hat{t} = \frac{tU}{\phi H}, \hat{\mathbf{q}}_t = U \mathbf{q}_t \quad (\text{A.1})$$

où les différentes quantités caractéristiques ont été définies précédemment dans le chapitre. Le nombre capillaire N_c et le nombre gravitaire N_g sont donnés par :

$$N_c = \frac{\sigma \sqrt{k_0 \times \phi}}{\mu_w \times U \times H} = \frac{p_e \times k_0}{\mu_w \times U \times H}, \quad (\text{A.2})$$

$$N_g = \frac{g \times \Delta \rho \times k_0}{U \times \mu_w}. \quad (\text{A.3})$$

Dans ce qui suit, les variables sans chapeau désignent par commodité les variables adimensionnées. L'équation (4.9) est réécrite sous la forme adimensionnée suivante :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \Phi(S) = 0, \quad (\text{A.4})$$

où le flux adimensionné de la phase non-mouillante $\Phi(S)$ est donné par

$$\Phi(S) = \mathbf{q}_t f(S) + N_g k \Lambda(S) \mathbf{e}_3 - N_c k \Lambda(S) \nabla p_c(S), \quad (\text{A.5})$$

où $p_c(S) = J(S)/\sqrt{k}$, avec $J(S)$ est la fonction de Leverett. On considère le cas injection dominante sans capillarité où le nombre gravitaire N_g est très petit.

$$N_g \approx \varepsilon^1, \quad N_c = 0. \quad (\text{A.6})$$

Par commodité, on pose

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \alpha_0; \alpha'_0 = \alpha'_0 = \left. \frac{d\alpha}{dS} \right|_{S=S_0}; \alpha''(S_0) = \alpha''_0 = \left. \frac{d^2\alpha}{dS^2} \right|_{S=S_0} \\ \beta_0 &= \beta_0; \beta'_0 = \beta'_0 = \left. \frac{d\beta}{dS} \right|_{S=S_0}; \beta''(S_0) = \beta''_0 = \left. \frac{d^2\beta}{dS^2} \right|_{S=S_0} \\ f_0^{(0)} &= f(S_0); f'(S_0) = f'_0 = \left. \frac{df}{dS} \right|_{S=S_0}; f''(S_0) = f''_0 = \left. \frac{d^2f}{dS^2} \right|_{S=S_0} \\ \Lambda_0 &= \Lambda(S_0); \Lambda'(S_0) = \Lambda'_0 = \left. \frac{d\Lambda}{dS} \right|_{S=S_0}; \Lambda''(S_0) = \Lambda''_0 = \left. \frac{d^2\Lambda}{dS^2} \right|_{S=S_0} \end{aligned}$$

• Développement du problème de transport :

Écrivons les équations (A.5) sous forme asymptotique :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \frac{\partial S_k}{\partial t} + \left(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}} \right) \cdot \Phi(S) = 0, \quad (\text{A.7})$$

où le flux est donné par :

$$\begin{aligned}\Phi &= \Phi_0 + \varepsilon \Phi_1 + \varepsilon^2 \Phi_2 + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \mathbf{q}_{t,k} [f(S_0) + \varepsilon S_1 f'_0 + \dots] + \varepsilon k [\Lambda_0 + \varepsilon S_1 \Lambda'_0 + \dots] \mathbf{e}_3\end{aligned}\quad (\text{A.8})$$

Considérons l'équation (A.8) aux différents ordres :

$$\begin{aligned}\varepsilon^0 &: \Phi_0 = \mathbf{q}_{t,0} f_0 \\ \varepsilon^1 &: \Phi_1 = \mathbf{q}_{t,0} S_1 f'_0 + \mathbf{q}_{t,1} f_0 + k \Lambda_0 \mathbf{e}_3 \\ \varepsilon^2 &: \Phi_2 = \mathbf{q}_{t,0} \left(\frac{1}{2} S_1 f''_0 + S_2 \right) + \mathbf{q}_{t,1} S_1 f'_0 + \mathbf{q}_{t,2} f_0 + k S_1 \Lambda'_0 \mathbf{e}_3\end{aligned}$$

Considérons l'équation (A.7) à l'ordre ε^{-1} et ε^0 :

$$\varepsilon^{-1} : \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_0 = \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} f_0 = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$\varepsilon^0 : \frac{\partial S_0}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \Phi_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_1 = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$\varepsilon^1 : \frac{\partial S_1}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \Phi_1 + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_2 = 0 \quad (\text{A.11})$$

En remplaçant les flux aux différents ordres par leurs expressions dans les équations de transport (A.9) -(A.11) ci-dessus, on obtient :

$$\varepsilon^{-1} : \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} f_0 = 0 \quad (\text{A.12})$$

$$\varepsilon^0 : \frac{\partial S_0}{\partial t} + \mathbf{q}_{t,0} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} f_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot (\mathbf{q}_{t,0} f_0 + \mathbf{q}_{t,0} S_1 f'_0 + k \Lambda_0 \mathbf{e}_3) = 0 \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned}\varepsilon^1 : \quad & \frac{\partial S_1}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot (\mathbf{q}_{t,1} f_0 + \mathbf{q}_{t,0} S_1 f'_0 + k \Lambda_0 \mathbf{e}_3) + \\ & + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \left(\mathbf{q}_{t,0} \frac{1}{2} S_1^2 f''_0 + \mathbf{q}_{t,0} S_2 + \mathbf{q}_{t,1} S_1 f'_0 + \mathbf{q}_{t,2} f_0 + k S_1 \Lambda'_0 \mathbf{e}_3 \right) = 0\end{aligned}\quad (\text{A.14})$$

L'équation en ε^{-1} conduit à $\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot f_0 = 0$, ce qui signifie que la saturation S_0 ne dépend pas de \mathbf{Y} , $S_0 \equiv S_0(\mathbf{X}, t)$.

• Développement du problème d'écoulement :

Considérons le problème d'écoulement sous une forme asymptotique à double échelle :

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_t &= \mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \varepsilon^2 \mathbf{q}_{t,2} + \dots \\ &= -k \alpha(S) \nabla p_w - k \beta(S) g \mathbf{e}_3 \\ &= -k [\alpha_0 + \varepsilon S_1 \alpha'_0 + \dots] \left[(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}}) (p_0 + \varepsilon p_1 + \dots) \right] - \\ &\quad - k [\beta_0 + \varepsilon S_1 \beta'_0 + \dots] g \mathbf{e}_3\end{aligned}\quad (\text{A.15})$$

Les équations de \mathbf{q}_t aux différents ordres s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 \varepsilon^{-1} & : 0 = -k\alpha_0 \nabla_{\mathbf{Y}} p_0 \\
 \varepsilon^0 & : \mathbf{q}_{t,0} = -k [\alpha_0 (\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1) + \beta_0 g \mathbf{e}_3] \\
 \varepsilon^1 & : \mathbf{q}_{t,1} = -k [\alpha_0 (\nabla_{\mathbf{X}} p_1 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_2) + S_1 \alpha'_0 (\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1) + S_1 \beta'_0 g \mathbf{e}_3]
 \end{aligned}$$

Notons que :

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_t = 0 \Rightarrow (\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{Y}}) \cdot (\mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots) = 0. \quad (\text{A.16})$$

Le développement asymptotique s'applique également à l'équation d'écoulement (??). On déduit donc

$$\varepsilon^{-1} : \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} = 0 \quad (\text{A.17})$$

$$\varepsilon^0 : \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,1} = 0 \quad (\text{A.18})$$

À l'ordre ε^{-1} , on a $\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} = 0$, d'où

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot [k\alpha_0 (\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1) + k\beta_0 g \mathbf{e}_3] = 0. \quad (\text{A.19})$$

La pression au premier ordre p_1 peut être calculée en appliquant le théorème de Lax-Milgram :

$$p_1 = \psi(\mathbf{Y}) \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \frac{\beta_0}{\alpha_0} g \mathbf{e}_3 \right) + p_{10}(\mathbf{X}, t),$$

où la fonction locale $\psi(\mathbf{Y})$ est la solution du problème local suivant :

$$\frac{\partial}{\partial Y_i} \left(k \left(\frac{\partial \psi_k}{\partial Y_i} + \delta_{ji} \right) \right) = 0, \quad (\text{A.20})$$

pour tous i, k avec $\langle \psi_j \rangle = 0$ et ψ périodique en \mathbf{Y} .

La vitesse totale à l'ordre zéro se réécrit :

$$\mathbf{q}_{t,0i} = - \left(k \left(\frac{\partial \psi_j}{\partial Y_i} + \delta_{ij} \right) \right) \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \frac{\beta_0}{\alpha_0} g \mathbf{e}_3 \right). \quad (\text{A.21})$$

• Dérivation du modèle mis à l'échelle :

Grâce à la condition de périodicité, on peut facilement déduire que :

$$\langle \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \bar{\Psi} \rangle = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \mathbf{Y}} d\Omega = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\partial\Omega} \bar{\Psi} \cdot \vec{n} d\Omega = 0, \quad (\text{A.22})$$

pour toute fonction $\bar{\Psi}$ périodique en \mathbf{Y} .

En moyennant l'équation (A.18) dans toute la cellule, on obtient :

$$\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle + \langle \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,1} \rangle = 0 \Rightarrow \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle = 0.$$

Prenons maintenant la moyenne de l'équation (A.13) et (A.14) :

$$\frac{\partial \langle S_0 \rangle}{\partial t} + \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \langle f_0 \rangle = 0. \quad (\text{A.23})$$

$$\frac{\partial \langle S_1 \rangle}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \mathbf{q}_{t,0} S_1 f'_0 + \mathbf{q}_{t,1} f_0 + k \Lambda_0 \mathbf{e}_3 \rangle = 0. \quad (\text{A.24})$$

Afin de construire l'équation mise à l'échelle à ordre ϵ^1 , il est impératif de déterminer S_1 . En soustrayant les deux équations (A.23) et (A.13), on déduit

$$f_0 \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} + \mathbf{q}_{t,0} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} f_0 + f_0 \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,1} + \mathbf{q}_{t,1} \cdot \nabla_{\mathbf{Y}} f_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot (\mathbf{q}_{t,0} S_1 f'_0) - \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \langle f_0 \rangle = 0.$$

En incorporant les équations (A.17), (A.18) et $\nabla_{\mathbf{Y}} f_0 = 0$, on peut déduire la relation entre S_0 et S_1 :

$$(\mathbf{q}_{t,0} - \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle) \cdot \nabla_{\mathbf{X}} S_0 + \mathbf{q}_{t,0} \cdot \nabla_{\mathbf{Y}} S_1 + \frac{\Lambda_0}{f'_0} g \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot k \mathbf{e}_3 = 0. \quad (\text{A.25})$$

La saturation au premier ordre S_1 peut être calculée en invoquant le théorème de Lax-Milgram (Lewandowska *et al.*, 2004; Auriault et Lewandowska, 1993; Panfilov et Floriat, 2004) :

$$S_1 = \varphi(\mathbf{Y}) \cdot \nabla_{\mathbf{X}} S_0 + \overline{S_1}(\mathbf{X}).$$

où la fonction φ qui est périodique en \mathbf{Y} ($\langle \varphi \rangle = 0$ en \mathbf{Y}) est la solution du problème local déduit à partir de l'équation (A.25).

$$(\mathbf{q}_{t,0} - \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle) \cdot \nabla_{\mathbf{X}} S_0 + \mathbf{q}_{t,0} \cdot \nabla_{\mathbf{Y}} \varphi \cdot \nabla_{\mathbf{X}} S_0 + \frac{\Lambda_0}{f'_0} g \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot k \mathbf{e}_3 = 0. \quad (\text{A.26})$$

Alors,

$$\frac{\partial f_0}{\partial X_i} \left[q_{t,0i} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial Y_i} + \delta_{ji} \right) - \langle q_{t,0j} \rangle \right] + \Lambda_0 g \frac{\partial k}{\partial Y_3} = 0. \quad (\text{A.27})$$

Définissons $\delta \mathbf{q}_{t,0} = \mathbf{q}_{t,0} - \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle$ comme la fluctuation de vitesse et les variables mises à l'échelle à ordre 1 :

$$\begin{cases} \langle S \rangle = \langle S_0 \rangle + \epsilon \langle S_1 \rangle \\ \langle \mathbf{q} \rangle = \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle + \epsilon \langle \mathbf{q}_{t,1} \rangle \end{cases}$$

Donc,

$$\begin{aligned} \langle f \rangle \langle \mathbf{q} \rangle &= \langle f_0 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle + \epsilon (\langle f_1 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle + \langle f_0 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,1} \rangle) + \epsilon^2 \langle f_1 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,1} \rangle \\ &= \langle f_0 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle + \epsilon (\langle f'_0 S_1 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle + \langle f_0 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,1} \rangle) + \epsilon^2 \langle f_1 \rangle \langle \mathbf{q}_{t,1} \rangle \end{aligned}$$

L'équation mise à l'échelle au premier ordre peut être obtenu en prenant la somme (A.23) + $\epsilon \times$ (A.24). Tous les termes en ϵ^2 sont négligés. Ainsi :

$$\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle f \rangle \langle \mathbf{q} \rangle + \epsilon \nabla_{X_3} \Lambda_0 \langle k \rangle + \epsilon \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \mathbf{q}_{t,0} f'_0 S_1 \rangle - \epsilon \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \langle f'_0 S_1 \rangle = 0. \quad (\text{A.28})$$

Notons que,

$$\begin{aligned}
 & \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle f'_0 S_1 \mathbf{q}_{t,0} \rangle - \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \mathbf{q}_{t,0} \rangle \langle f'_0 S_1 \rangle \\
 &= \frac{\partial}{\partial X_i} \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial f'_0 S_1 q_{t,0i}}{\partial Y_i} d\Omega - \frac{\partial}{\partial X_i} \langle q_{t,0i} \rangle \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial f'_0 S_1}{\partial Y_i} d\Omega \\
 &= \frac{\partial}{\partial X_i} \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial Y_i} f'_0 q_{t,0i} \frac{\partial S_0}{\partial X_j} \varphi_j d\Omega + \frac{\partial}{\partial X_i} \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial Y_j} f'_0 q_{t,0i} \overline{S_1} d\Omega \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial X_i} \langle q_{t,0i} \rangle \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} f'_0 \varphi_j \frac{\partial S_0}{\partial X_j} d\Omega - \frac{\partial}{\partial X_i} \langle q_{t,0i} \rangle \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} f'_0 \overline{S_1} d\Omega \\
 &= \frac{\partial}{\partial X_i} \left[f'_0 \frac{\partial S_0}{\partial X_j} (\langle q_{t,0i} \varphi_j \rangle - \langle q_{t,0i} \rangle \langle \varphi_j \rangle) \right] \\
 &= \frac{\partial}{\partial X_i} \left[f'_0 \frac{\partial S_0}{\partial X_j} \langle q_{t,0i} \varphi_j \rangle \right]
 \end{aligned}$$

Finalement, on obtient les équations moyennées au premier ordre pour une injection dominante :

$$\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial t} + \langle \mathbf{q} \rangle \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \langle f \rangle + \varepsilon \frac{\partial \Lambda_0 \langle k \rangle}{\partial X_3} + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\hat{D}_{ik} \frac{\partial S}{\partial X_j} \right) = 0 \quad (\text{A.29})$$

$$\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \langle \mathbf{q} \rangle = 0 \quad (\text{A.30})$$

Le tenseur de dispersion est défini par :

$$\tilde{D}_{ij} = \varepsilon \langle f \rangle' \langle \mathbf{q}_{t,0i} \varphi_j \rangle. \quad (\text{A.31})$$

La dispersion est proportionnelle à la dérivée du flux fractionnaire $\langle f \rangle'$, résultat similaire à celui de Panfilov et Floriat (2004). Ce résultat est aussi obtenu par Neuweiler *et al.* (2003) pour les milieux stochastiques faiblement hétérogènes.

La fonction φ est la solution du problème local (A.27). En général, quand les variables micro et macroscopiques ne sont pas séparées, φ dépend en même temps de \mathbf{Y} , \mathbf{X} et t .

De façon similaire au cas gravité dominante discuté dans le chapitre 4, la vitesse totale est approximée par sa contribution à l'ordre zéro.

$$\mathbf{q}_{t,0i} = \langle \mathbf{q}_{t,0i} \rangle = - \left\langle k \left(\frac{\partial \psi_j}{\partial Y_i} + \delta_{ij} \right) \right\rangle \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \frac{\beta_0}{\alpha_0} g \mathbf{e}_3 \right). \quad (\text{A.32})$$

Appelons \tilde{k} le tenseur de perméabilité mis à l'échelle. On en déduit :

$$\tilde{k}_{ij} = - \left\langle k \left(\frac{\partial \psi_j}{\partial Y_i} + \delta_{ij} \right) \right\rangle = \left\langle k \frac{\partial \psi_j}{\partial Y_i} + k \delta_{ji} \right\rangle. \quad (\text{A.33})$$

Le premier terme à droite de l'équation (A.33) donne la correction de la perméabilité effective \tilde{k}_{ij} à la perméabilité moyenne $\langle k_{ij} \rangle$.

Dans le cas unidimensionnel, où la perméabilité $k(\mathbf{Y})$ est supposé être indépendant des variables macroscopiques \mathbf{X} , le problème local s'écrit :

$$-\frac{d}{dY} \left(k \frac{d\psi}{dY} \right) = \frac{dk}{dY}. \quad (\text{A.34})$$

Intégration de cette équation nous donne :

$$\frac{d\psi}{dY} = -1 + \frac{c}{k}, \quad (\text{A.35})$$

où c est un constant. Prenons la moyenne de l'équation (A.35) dans toute la cellule :

$$c = \frac{1}{\langle 1/k \rangle}. \quad (\text{A.36})$$

Donc, la perméabilité effective dans l'équation (A.33) se réécrit :

$$\tilde{k} = - \left\langle k \frac{d\psi}{dY} + k \right\rangle = c. \quad (\text{A.37})$$

La perméabilité effective dans le cas 1D est la moyenne harmonique, ce qui est également obtenu par Mouche *et al.* (2010) dans le cas de montée purement gravitaire.

A.2 Validation du modèle

A.2.1 Présentation du cas test

Dans ce qui suit, on reprend la géométrie que l'on a utilisé dans le chapitre 4. La colonne, de 200 m de haut et 40 m de large, comprend au total 10 cellules. La hauteur d'une cellule est donc de 20 m. Le CO₂ est injecté en bas de la colonne. Notons que l'écoulement à macro-échelle est unidimensionnel suivant l'axe X_3 du champ de gravité. Le paramètre ε est donc égal à 0,10 suivant la direction d'écoulement macroscopique.

La perméabilité relative du CO₂ et celle de la saumure sont :

$$k_{r_{nw}} = S^2, \quad k_{r_w} = (1 - S)^2, \quad (\text{A.38})$$

où S est la saturation de CO₂.

Le milieu est supposé être isotrope, le tenseur de perméabilité est donc diagonal

$$k_{jj} = \begin{cases} k^m & \text{pour la matrice,} \\ k^i & \text{pour l'inclusion.} \end{cases}$$

pour $j \in \{1, 2, 3\}$.

A.2.2 Calcul des paramètres effectifs

Pour déterminer la perméabilité effective, il faut calculer la fonction $\psi(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$. Le problème local (A.20) est un problème classique en théorie de l'homogénéisation dont la solution périodique ψ est unique et deux fois dérivable, même si la perméabilité k est discontinue dans la cellule (Panfilov et Floriat, 2004). La résolution de ce problème nécessite de connaître la géométrie de la cellule. Cette cellule consiste en une matrice

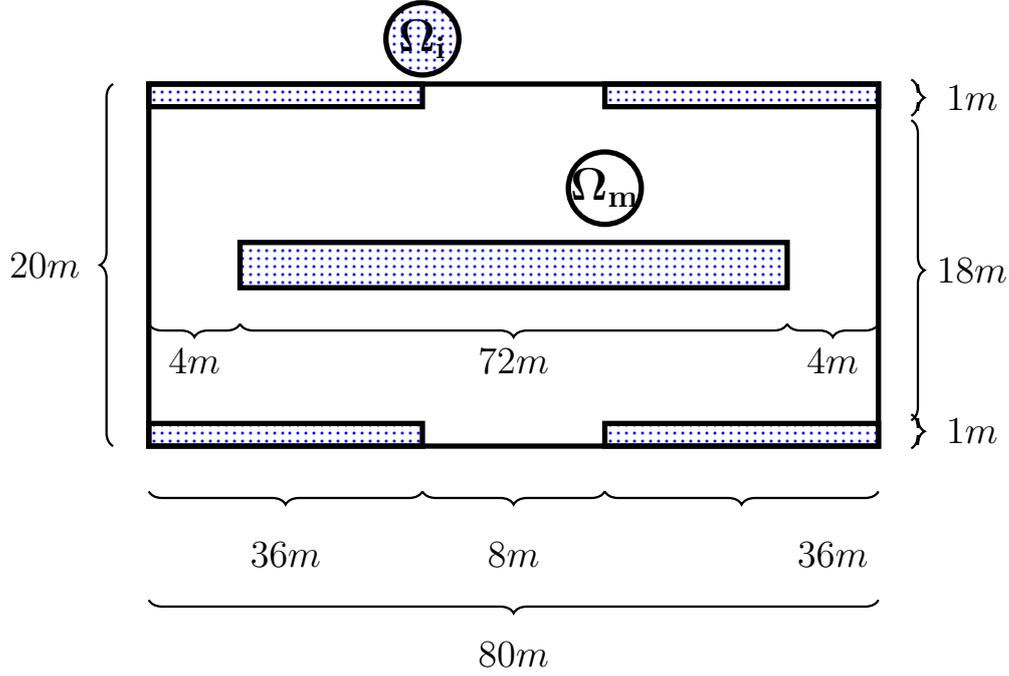


Figure A.1 – Dimensions d'une cellule.

et des inclusions décalées comme schématisé sur la figure A.1. En général, le problème local est résolu numériquement excepté dans certains cas particuliers.

Comme l'écoulement macroscopique est unidimensionnel suivant l'axe X_3 , seule la composante \tilde{k}_{33} de la perméabilité effective doit être déterminée. Son calcul est basé sur la détermination de la fonction $\psi_3 = \psi_3(Y_1, Y_3)$. Celle ci est déterminée à partir de l'équation suivante :

$$-\frac{\partial}{\partial Y_i} \left(k \frac{\partial \psi_3}{\partial Y_i} \right) = \frac{\partial k}{\partial Y_3}, \quad (\text{A.39})$$

et les conditions aux limites périodiques

$$\psi_3(Y_1 = \min\{Y_1\}, Y_3) = \psi_3(Y_1 = \max\{Y_1\}, Y_3) \quad (\text{A.40})$$

$$\psi_3(Y_1, Y_3 = \min\{Y_3\}) = \psi_3(Y_1, Y_3 = \max\{Y_3\}) \quad (\text{A.41})$$

Le système des équations (A.39), (A.40) et (A.41) est résolu à l'aide de l'outil *pdetool* (Partial Differential Equation Toolbox) de Matlab en utilisant le méthode des éléments finis. La Figure représente la fonction $\psi_3(Y_1, Y_3)$ et le gradient $\frac{\partial \psi_3}{\partial Y_3}$ dans le cas $k^i/k^m = \frac{1}{10}$.

La perméabilité effective calculée à partir de l'équation (A.33) est :

$$\tilde{k} = 0,58k^m \quad (\text{A.42})$$

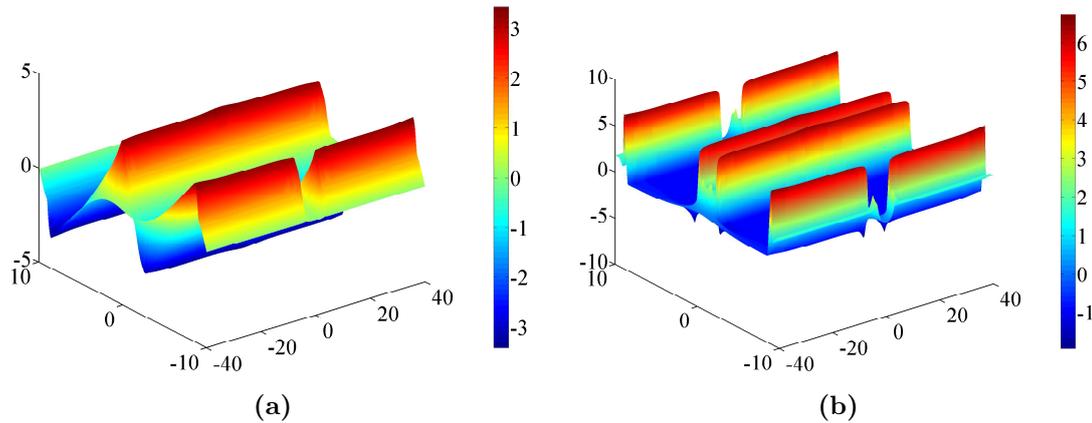


Figure A.2 – Fonction ψ_3 (a) et le gradient $\partial\psi_3/\partial Y_3$ (b) dans la cellule pour le rapport $k^i/k^m = 0,10$.

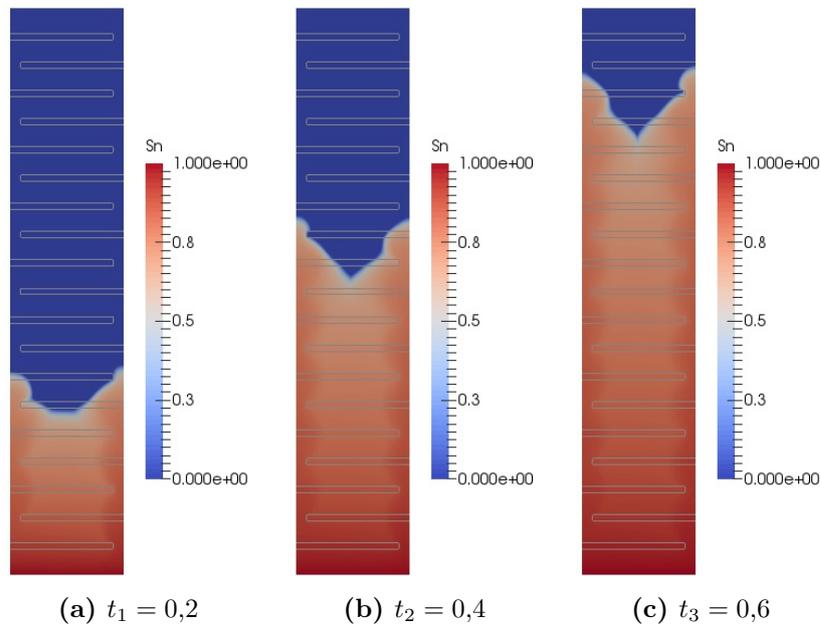


Figure A.3 – Carte de saturation du CO_2 dans la colonne bi-dimensionnelle à différents temps pour $N_g = 0,1$. Les interfaces entre la matrice et les inclusions sont représentées par les rectangles. Le temps est adimensionné (équation (A.1)).

A.2.3 Résultat des simulations : Solution du problème macroscopique

La Figure A.3 montre l'évolution temporelle du CO_2 pour $N_g = 0,1$. On voit bien l'effet de l'hétérogénéité sur la propagation du CO_2 , notamment au niveau du front. Néanmoins, la dispersion n'est pas très forte dans ce cas, ce qui s'exprime par la similarité des fronts de saturation aux temps t_2 et t_3 .

L'évolution temporelle du CO_2 pour le cas $N_g = 0,5$ est présentée dans la Figure A.4.

La vitesse d'injection est cinq fois plus faible que celle du cas $N_g = 0.1$. Notons que le temps est adimensionné par le temps de transfert dans toute la colonne avec la vitesse d'injection (équation (A.1)). Cette fois-ci, on voit bien l'effet de gravité sur la propagation du CO_2 en comparant la carte de saturation au temps t_2 et t_3 . Au temps t_2 , la distance entre l'avant du front et l'arrière couvre trois hétérogénéités tandis que cette distance monte jusqu'à quatre hétérogénéités au temps t_3 .

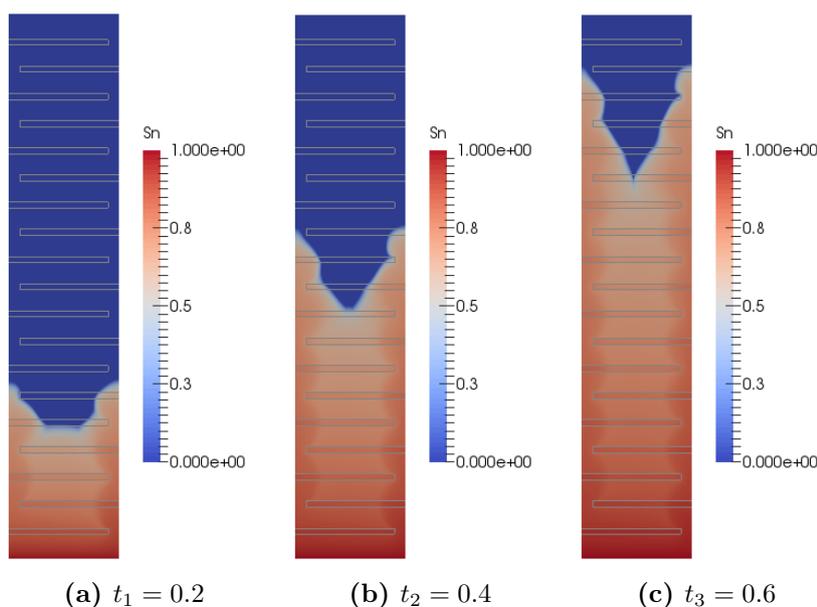


Figure A.4 – Carte de saturation du CO_2 dans la colonne bi-dimensionnelle à différents temps pour $N_g = 0,5$. Les interfaces entre la matrice et les inclusions sont représentées par les rectangles. Le temps est adimensionné (équation (A.1)).

À partir des résultats de DuMu^x, la saturation dans la cellule est moyennée numériquement. La Figure A.5 montre une comparaison entre le profil de saturation du modèle mis à l'échelle gouverné par l'équation (A.29) en négligeant la dispersion et celui moyenné numériquement dans chaque cellule à partir des simulations avec DuMu^x pour $N_g = 0,10$ et $N_g = 0,50$.

Lorsque $N_g = 0,10$, le modèle analytique rend bien compte de l'évolution du CO_2 à l'échelle macroscopique, notamment sur la partie détente du profil. La vitesse d'avancée moyenne du front est bien respectée. Cela n'est plus le cas pour $N_g = 0,50$ qui, par ailleurs, n'est pas vraiment dans la limite $N_g \approx \varepsilon$.

A.2.4 Résultat des simulations : Dispersion longitudinale

À partir des cartes de saturation A.3, A.4 ainsi que des profils de saturation moyen suivant l'axe X_3 , on trouve que la vitesse d'injection a tendance à homogénéiser le profil de saturation du CO_2 à l'arrière du front. Par ailleurs, plus le nombre de gravité est fort plus la dispersion est forte. Cela peut s'expliquer par le fait que lorsque la vitesse d'injection croît la fonction φ dans l'équation (A.27) décroît, ce qui par conséquent, réduit

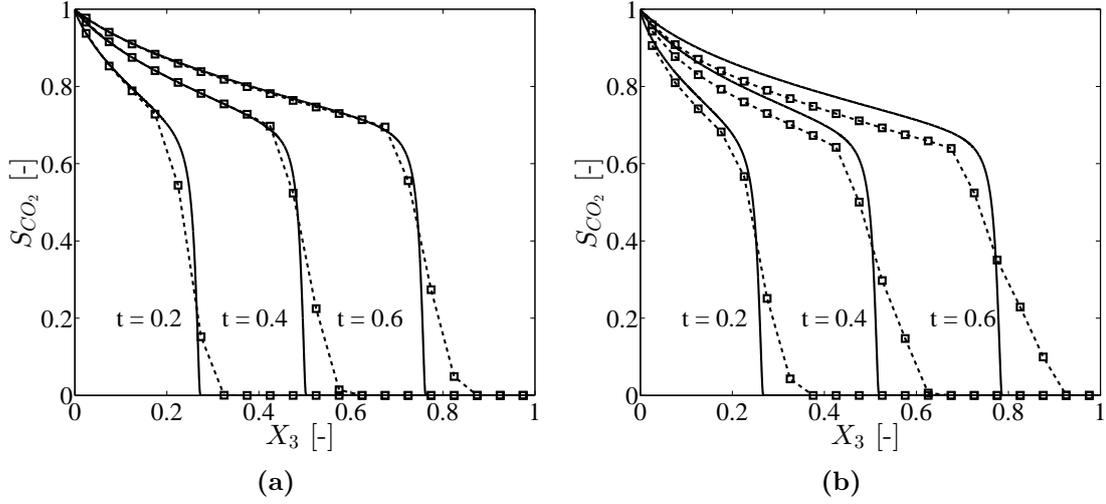


Figure A.5 – Profils de saturation de CO₂ en fonction de la coordonnée verticale pour le cas $N_g = 0,10$ (a) et $N_g = 0,50$ (b). Les courbes continues sont les solutions dans le milieu homogène équivalent en négligeant la dispersion, tandis que les courbes discontinues représente profil de saturation moyenné dans la cellule à partir de simulation numérique avec DuMu^x dans le milieu hétérogène.

la valeur du coefficient de dispersion (équation (A.31)).

Pour déterminer le tenseur de dispersion macroscopique (ou macrodispersion), il faut calculer la fonction φ . Pour cela, il faut d'abord résoudre l'équation (A.27) dont les variables macroscopiques et microscopiques en général ne se séparent pas. Autrement dit, le tenseur de dispersion varie en fonction du temps et de l'espace.

Pour calculer la dispersion du panache de CO₂ calculé numériquement, nous appliquons la méthode des moments spatiaux (Bolster *et al.*, 2009). Rappelons que les moments dans la direction de l'écoulement macroscopique suivant l'axe X_3 sont donnés par les équations suivantes (Freyberg, 1986; Tompson et Gelhar, 1990; Han *et al.*, 2010; Bolster *et al.*, 2009, 2011) :

$$M^{(0)}(t) = \int d\mathbf{X} S(\mathbf{X}, t), \quad M_3^{(1)}(t) = \int d\mathbf{X} X_3 S(\mathbf{X}, t), \quad M_{33}^{(2)}(t) = \int d\mathbf{X} X_3^2 S(\mathbf{X}, t), \quad (\text{A.43})$$

Le premier et deuxième moment centrés s'écrivent :

$$m_3^{(1)}(t) = \frac{M_3^{(1)}(t)}{M^{(0)}(t)}, \quad m_{33}^{(2)}(t) = \frac{M_{33}^{(2)}(t)}{M^{(0)}(t)} - \left(\frac{M_3^{(1)}(t)}{M^{(0)}(t)} \right)^2. \quad (\text{A.44})$$

Le moment d'ordre zéro $M^{(0)}(t)$ est proportionnel à la masse totale du CO₂, le moment d'ordre un $m_3^{(1)}(t)$ décrit la propagation du centre de masse tandis que le deuxième moment spatial $m_{33}^{(2)}(t)$ décrit l'étalement autour du centre de masse, *i.e.* épaisseur du front de saturation. L'évolution de l'épaisseur de ce dernier est caractérisée par un coefficient de macrodispersion apparente :

$$D^a(t) = \frac{1}{2} \frac{dm_{33}^{(2)}}{dt} \quad (\text{A.45})$$

La Figure A.6 montre l'évolution temporelle de la dérivée temporelle du second moment centré $m_{33}^{(2)}$ dans les milieux périodique et homogène pour $N_g = 0,10$ et $N_g = 0,50$. On constate que la gravité contribue à la dispersion longitudinale, ce qui s'exprime par un écart entre les courbes du milieu périodique et du milieu homogène plus important pour $N_g = 0,50$ (Figure A.6b) que pour $N_g = 0,10$ (Figure A.6a).

Bolster *et al.* (2011) a particulièrement bien analysé l'effet de gravité sur la propagation du front de saturation d'un fluide pendant la période d'injection dans un réservoir initialement saturé en un autre fluide. Ce pendant, cette étude ne s'applique qu'aux milieux faiblement hétérogènes.

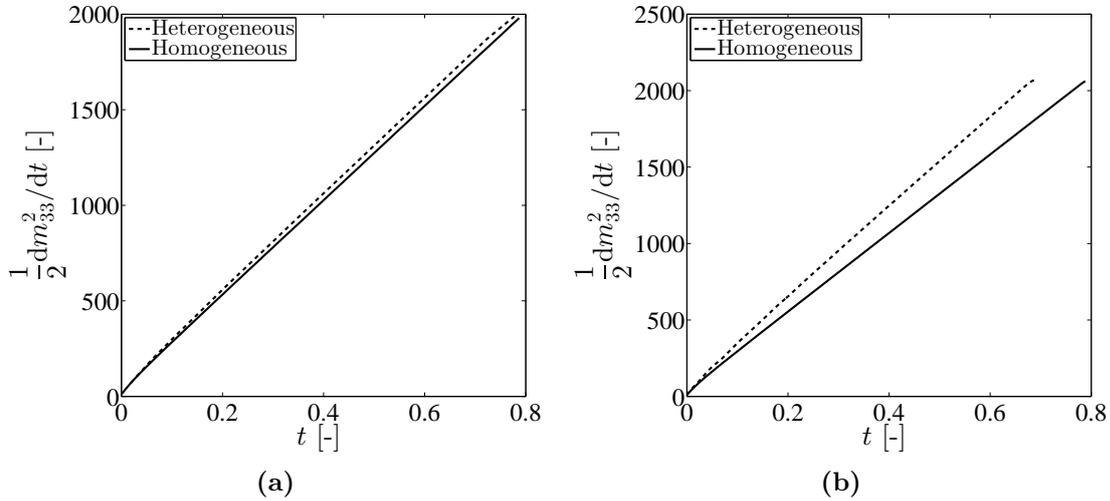


Figure A.6 – Dérivée temporelle du second moment centré pour les milieux périodique et homogène pour $N_g = 0,10$ (a) et $N_g = 0,50$ (b). La différence entre ces courbes souligne l'effet de l'hétérogénéité.

A.3 Conclusion

Dans cette annexe, nous avons proposé une mise à l'échelle d'un modèle d'écoulement du CO_2 , dans le cas injection dominante et capillarité négligée, en utilisant la méthode du développement asymptotique à double échelle. Ce modèle nous a permis de calculer la perméabilité effective du milieu homogène équivalent, ainsi que le tenseur de dispersion due à l'hétérogénéité du milieu. Le modèle a ensuite été validé par des simulations numériques réalisées à l'aide du code DuMu^x pour différentes valeurs du nombre gravitaire N_g . Le modèle concorde bien avec les résultats numériques pour des faibles valeurs de N_g restant dans la limite $N_g \approx \varepsilon$. Finalement, l'analyse numérique des moments montre l'influence de la gravité sur la macrodispersion lors de la montée du CO_2 dans une colonne stratifiée bidimensionnelle.

Annexe **B**

Régime de gravité dominante, sans capillarité - Analyse perturbative

Always do what you are afraid to do.

Ralph Waldo Emerson

Sommaire

B.1	Introduction	174
B.2	Modèle analytique	174
B.3	Validation du modèle mis à l'échelle	180
B.4	Conclusion	185
	Bibliographie	187

B.1 Introduction

Dans ce cas, on considère la montée purement gravitaire de CO_2 dans une colonne stratifiée périodique. Comme l'effet de gravité est dominant, la saturation à ordre zéro de la séparation d'échelle S_0 doit être considérée comme une fonction des variables macroscopiques ainsi que des variables microscopiques. La méthode d'analyse en perturbation est utilisée pour déterminer S_0 à l'échelle de la cellule, en supposant que le milieu est faiblement hétérogène : la perméabilité des inclusions est proche de celle de la matrice. Nous proposons donc ici un modèle mis à l'échelle basé sur la résolution de S_0 par la théorie des perturbations. Des simulations numériques sont ensuite effectuées pour valider le modèle théorique. Malgré sa limite de validité, l'analyse en perturbations fournit un support qui permet de mieux comprendre les phénomènes physiques.

B.2 Modèle analytique

Vu la complexité des équations induite par la présence de la diffusion capillaire, l'analyse en perturbation sera faite en négligeant la capillarité et en ne considérant que la gravité et la vitesse. Il faut néanmoins noter que l'hypothèse selon laquelle la capillarité est négligeable n'est pas réaliste.

Rappelons l'équation de transport du problème :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \Phi = 0 \quad (\text{B.1a})$$

$$\Phi = \mathbf{q}_t f(S) + k\Lambda(S)\Delta\rho g\mathbf{e}_3 \quad (\text{B.1b})$$

et la vitesse darcéenne :

$$\mathbf{q}_t = -k(\alpha(S)\nabla p + \beta(S)g\mathbf{e}_3) \quad (\text{B.2a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_t = 0 \quad (\text{B.2b})$$

En appliquant le développement asymptotique en ε , on obtient :

$$S \equiv S^\varepsilon = S_0 + \varepsilon S_1 + \dots ; p \equiv p^\varepsilon = p_0 + \varepsilon p_1 + \dots ;$$

$$\mathbf{q}_t \equiv \mathbf{q}_t^\varepsilon = \mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots ; \Phi \equiv \Phi^\varepsilon = \Phi_0 + \varepsilon \Phi_1 + \dots$$

L'équation (B.2) devient donc :

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots = & -k\alpha(S_0 + \varepsilon S_1 + \dots)(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1}\nabla_{\mathbf{Y}})(p_0 + \varepsilon p_1 + \dots) \\ & - k\beta(S_0 + \varepsilon S_1 + \dots)g\mathbf{e}_3 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

et

$$(\nabla_{\mathbf{X}} + \varepsilon^{-1}\nabla_{\mathbf{Y}}) \cdot (\mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots) = 0 \quad (\text{B.4})$$

Considérons l'équation (B.3) à l'ordre ε^0 , ε^1 .

$$\begin{aligned}\varepsilon^0 & : \mathbf{q}_{t,0} = -k [\alpha_0 (\nabla_{\mathbf{x}} p_0 + \nabla_{\mathbf{y}} p_1) + \beta_0 g \mathbf{e}_3] \\ \varepsilon^1 & : \mathbf{q}_{t,1} = -k [\alpha_0 (\nabla_{\mathbf{x}} p_1 + \nabla_{\mathbf{y}} p_2) + S_1 \alpha'_0 (\nabla_{\mathbf{x}} p_0 + \nabla_{\mathbf{y}} p_1) + S_1 \beta'_0 g \mathbf{e}_3]\end{aligned}$$

Le développement de l'équation(B.4) nous donne

$$\begin{aligned}\varepsilon^{-1} & : \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} = 0 \\ \varepsilon^0 & : \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_{t,0} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathbf{q}_{t,1} = 0\end{aligned}$$

Développons l'équation de transport :

$$\begin{aligned}\frac{\partial (S_0 + \varepsilon S_1 + \dots)}{\partial t} + (\nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) \cdot \{(\mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots) f(S_0 + \varepsilon S_1 + \dots) \\ + k \Lambda (S_0 + \varepsilon S_1 + \dots) \Delta \rho g \mathbf{e}_3\} = 0.\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

Le flux Φ dans l'équation(B.1b) peut se réécrire comme suit :

$$\Phi = (\mathbf{q}_{t,0} + \varepsilon \mathbf{q}_{t,1} + \dots) f(S_0 + \varepsilon S_1 + \dots) + k \Lambda (S_0 + \varepsilon S_1 + \dots) \Delta \rho g \mathbf{e}_3.$$

Considérons l'équation(B.5) aux ordres ε^{-1} et ε^0 :

$$\begin{aligned}\varepsilon^{-1} & : \Phi_0 = f_0 \mathbf{q}_{t,0} + k \Lambda_0 g \mathbf{e}_3 \\ & \quad \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \Phi_0 = 0 \\ \varepsilon^0 & : \Phi_1 = f_0 \mathbf{q}_{t,1} + S_1 f'_0 \mathbf{q}_{t,0} + k S_1 \Lambda'_0 g \mathbf{e}_3 \\ & \quad \frac{\partial S_0}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \Phi_0 + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \Phi_1 = 0\end{aligned}$$

Dans l'approche stochastique pour les milieux hétérogènes aléatoires, la forme logarithmique de la perméabilité $\ln k$ est souvent utilisée au lieu de k . Posons $Y_k = \ln k = \langle Y_k \rangle + \nu y_k$, où $\langle Y_k \rangle$ et y_k sont respectivement la valeur moyenne et la fluctuation du logarithme de la perméabilité et ν un paramètre variant entre zéro et un. Notons $k_G = \exp(\langle Y_k \rangle)$ la moyenne géométrique de la perméabilité. Donc, le champ de perméabilité se réécrit :

$$k = k_G \left(1 + \nu y_k + \frac{1}{2} \nu^2 y_k^2 + \dots \right). \quad (\text{B.6})$$

En substituant l'équation(B.6) à l'équation de la vitesse, on obtient

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{t,0}^\nu = -k_G \left(1 + \nu y_k + \frac{1}{2} \nu^2 y_k^2 + \dots \right) \left[\alpha (S_0^{(0)} + \nu S_0^{(1)} + \dots) (\nabla_{\mathbf{x}} p_0 + \nabla_{\mathbf{y}} (p_1^{(0)} + \nu p_1^{(1)} + \dots)) \right. \\ \left. + \beta (S_0^{(0)} + \nu S_0^{(1)} + \dots) g \mathbf{e}_3 \right].\end{aligned}\quad (\text{B.7})$$

On note que lorsque $\nu \rightarrow 0$, le milieu devient homogène, la fluctuation de pression p_1 doit tendre vers zéro. Donc, la pression à l'ordre ν^0 , $p_1^{(0)}$ doit être nulle.

Posons :

$$\begin{aligned}
 \alpha(S_0^{(0)}) &= \alpha_0^{(0)} ; \alpha'(S_0^{(0)}) = \alpha_0'^{(0)} ; \alpha''(S_0^{(0)}) = \alpha_0''^{(0)} \\
 \beta(S_0^{(0)}) &= \beta_0^{(0)} ; \beta'(S_0^{(0)}) = \beta_0'^{(0)} ; \beta''(S_0^{(0)}) = \beta_0''^{(0)} \\
 f(S_0^{(0)}) &= f_0^{(0)} ; f'(S_0^{(0)}) = f_0'^{(0)} ; f''(S_0^{(0)}) = f_0''^{(0)} \\
 \Lambda(S_0^{(0)}) &= \Lambda_0^{(0)} ; \Lambda'(S_0^{(0)}) = \Lambda_0'^{(0)} ; \Lambda''(S_0^{(0)}) = \Lambda_0''^{(0)}
 \end{aligned}$$

$$\nu^0 : \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} = -k_G \left[\alpha_0^{(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{(0)} g \mathbf{e}_3 \right] \quad (\text{B.8})$$

$$\nu^1 : \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} = -k_G \left[\alpha_0^{(0)} \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(1)} + S_0^{(1)} \alpha_0'^{(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + S_0^{(1)} \beta_0'^{(0)} g \mathbf{e}_3 \right] - y_k \mathbf{q}_{t,0}^0 \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned}
 \nu^2 : \mathbf{q}_{t,0}^{(2)} &= -k_G \left[\alpha_0^{(0)} \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(2)} + S_0^{(1)} \alpha_0'^{(0)} \nabla_{\mathbf{X}} p_1^{(1)} + \left(S_0^{(2)} \alpha_0'^{(0)} + \frac{1}{2} (S_0^{(1)})^2 \alpha_0''^{(0)} \right) \nabla_{\mathbf{X}} p_0 \right. \\
 &\quad \left. + \left(S_0^{(2)} \beta_0'^{(0)} + \frac{1}{2} (S_0^{(1)})^2 \beta_0''^{(0)} \right) g \mathbf{e}_3 \right] - y_k \mathbf{q}_{t,0}^1 - \frac{1}{2} y_k^2 \mathbf{q}_{t,0}^0
 \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Le condition (B.2b) conduit à :

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} = 0 ; \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} = 0 \text{ et } \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0}^{(2)} = 0. \quad (\text{B.11})$$

Regardons la fonction du flux à l'ordre zéro en ε , Φ_0'

$$\Phi_0' = \left(f_0^{(0)} + \nu S_0^{(1)} f_0'^{(0)} + \dots \right) \left(\mathbf{q}_{t,0}^{(0)} + \nu \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} + \dots \right) \quad (\text{B.12})$$

$$+ k_G (1 + \nu y_k + \dots) \left(\Lambda_0^{(0)} + \nu S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} + \dots \right) \Delta \rho g \mathbf{e}_3. \quad (\text{B.13})$$

Donc,

$$\nu^0 : \Phi_0^{(0)} = f_0^{(0)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} + k_G \Lambda_0^{(0)} \Delta \rho g \mathbf{e}_3 \quad (\text{B.14})$$

$$\nu^1 : \Phi_0^{(1)} = S_0^{(1)} f_0'^{(0)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} + f_0^{(0)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} + k_G \left(y_k \Lambda_0^{(0)} + S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} \right) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned}
 \nu^2 : \Phi_0^{(2)} &= \left(\frac{1}{2} f_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 + S_0^{(2)} f_0'^{(0)} \right) \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} + S_0^{(1)} f_0'^{(0)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} + f_0^{(0)} \mathbf{q}_{t,0}^{(2)} \\
 &\quad + k_G \left[\frac{1}{2} \Lambda_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 + y_k S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} + S_0^{(2)} \Lambda_0'^{(0)} + \frac{1}{2} \Lambda_0^{(0)} y_k^2 \right] \Delta \rho g \mathbf{e}_3
 \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Puisque $\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_0 = 0$, on obtient

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_0^{(0)} = 0 ; \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_0^{(1)} = 0 \text{ et } \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \Phi_0^{(2)} = 0 \quad (\text{B.17})$$

La première condition est satisfaite si et seulement si $S_0^{(0)}$ ne dépend pas de \mathbf{Y} : $S_0^{(0)} = S_0^{(0)}(\mathbf{X}, t)$. La deuxième condition conduit à :

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \left[S_0^{(1)} f_0'^{(0)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} + k_G \left(y_k \Lambda_0^{(0)} + S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} \right) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 \right] = 0 \quad (\text{B.18})$$

Notons que

$$\langle \mathbf{q}_{t,0}^{(i)} \rangle = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{q}_{t,0}^{(i)}}{\partial \mathbf{Y}} d\Omega = 0,$$

et

$$\langle y_k \rangle = 0.$$

En moyennant les équations (B.14), (B.15) et (B.16) dans toute la cellule, on obtient :

$$\nu^0 : \langle \Phi_0^{(0)} \rangle = k_G \langle \Lambda_0^{(0)} \rangle g \mathbf{e}_3 \quad (\text{B.19})$$

$$\nu^1 : \langle \Phi_0^{(1)} \rangle = f_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle + k_G \Lambda_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} \nu^2 : \langle \Phi_0^{(2)} \rangle = & \left\langle \left(\frac{1}{2} f_0^{\prime\prime(0)} (S_0^{(1)})^2 + S_0^{(2)} f_0^{\prime(0)} \right) \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \right\rangle + f_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle + \\ & + k_G \left\langle \frac{1}{2} \Lambda_0^{\prime\prime(0)} (S_0^{(1)})^2 + y_k S_0^{(1)} \Lambda_0^{\prime(0)} + S_0^{(2)} \Lambda_0^{\prime(0)} + \frac{1}{2} \Lambda_0^{(0)} y_k^2 \right\rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

• **Approximation à l'ordre ν^1 :**

Dans un premier temps, on considère l'approximation au premier ordre ν^1 de l'équation de transport mise à l'échelle. Elle s'obtient en prenant la somme (B.19) + $\nu \times$ (B.20) :

$$\langle \Phi_0 \rangle = k_G \langle \Lambda_0^{(0)} \rangle g \mathbf{e}_3 + \nu f_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle + k_G \nu \Lambda_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3$$

$$\Rightarrow \langle \Phi_0 \rangle = k_G \langle \Lambda_0^{(0)} \rangle g \mathbf{e}_3 + \nu f_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle + k_G \nu \Lambda_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3$$

Notons que $\langle \Lambda_0^{(0)} \rangle = \Lambda_0^{(0)}$ car $S_0^{(0)}$ ne dépend pas de \mathbf{Y} . En négligeant les termes en ν^2 , on obtient :

$$\Lambda(\langle S_0 \rangle) \approx \Lambda(S_0^{(0)} + \nu \langle S_0^{(1)} \rangle) = \Lambda_0^{(0)} + \nu \Lambda_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Phi_0 \rangle = k_G \Lambda(\langle S_0 \rangle) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \nu f_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle.$$

L'équation mise à l'échelle à l'ordre ν^1 s'écrit :

$$\frac{\partial \langle S_0 \rangle}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\{ k_G \Lambda(\langle S_0 \rangle) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \nu f_0^{\prime(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle \right\} = 0. \quad (\text{B.22})$$

En l'absence de vitesse d'injection, l'équation mise à l'échelle (B.22) se simplifie en :

$$\frac{\partial \langle S_0 \rangle}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (k_G \Lambda(\langle S_0 \rangle) \Delta \rho g \mathbf{e}_3) = 0. \quad (\text{B.23})$$

• **Approximation à l'ordre ν^2 :**

Maintenant, on considère l'équation effective au deuxième ordre ν^2 . Elle s'obtient en faisant la somme (B.19) + $\nu \times$ (B.20) + $\nu^2 \times$ (B.21) :

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_0 \rangle &= k_G \Lambda_0^{(0)} g \mathbf{e}_3 + \nu f_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle + k_G \nu \Lambda_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \\
 &\nu^2 \left\langle \left\{ \frac{1}{2} f_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 + S_0^{(2)} f_0'^{(0)} \right\} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \right\rangle + \nu^2 f_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle + \\
 &+ k_G \nu^2 \left\langle \frac{1}{2} \Lambda_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 + y_k S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} + S_0^{(2)} \Lambda_0'^{(0)} + \frac{1}{2} \Lambda_0^{(0)} y_k^2 \right\rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3
 \end{aligned} \tag{B.24}$$

Notons que :

$$\begin{aligned}
 \Lambda (\langle S_0 \rangle) &\approx \Lambda \left(\langle S_0^{(0)} + \nu S_0^{(1)} + \nu^2 S_0^{(2)} \rangle \right) \\
 &= \Lambda_0^{(0)} + \nu \Lambda_0'^{(0)} \left(\langle S_0^{(1)} \rangle + \nu \langle S_0^{(2)} \rangle \right) + \frac{1}{2} \nu^2 \Lambda_0''^{(0)} \left(\langle S_0^{(1)} \rangle + \nu \langle S_0^{(2)} \rangle \right)^2 \\
 &\approx \Lambda_0^{(0)} + \nu \Lambda_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \rangle + \nu^2 \Lambda_0'^{(0)} \langle S_0^{(2)} \rangle + \frac{1}{2} \nu^2 \Lambda_0''^{(0)} \left(\langle S_0^{(1)} \rangle \right)^2.
 \end{aligned}$$

L'approximation au deuxième ordre de Φ_0 est obtenue en négligeant les termes d'un ordre supérieur à 3 :

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_0 \rangle &= k_G \Lambda (\langle S_0 \rangle) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \nu f_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \rangle + \nu^2 \left\langle \left\{ \frac{1}{2} f_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 + S_0^{(2)} f_0'^{(0)} \right\} \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} \right\rangle \\
 &+ \nu^2 f_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle + \nu^2 k_G \left\langle \frac{1}{2} \Lambda_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 + y_k S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} + \frac{1}{2} \Lambda_0^{(0)} y_k^2 \right\rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3.
 \end{aligned}$$

En l'absence de vitesse d'injection ($\mathbf{q}_{t,0}^{(0)} = 0$), on a

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_0 \rangle &= k_G \langle \Lambda_0 \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \nu^2 f_0'^{(0)} \langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle + \nu^2 k_G \left\langle y_k S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} + \frac{1}{2} \Lambda_0^{(0)} y_k^2 \right\rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \\
 &+ \nu^2 k_G \left\langle \frac{1}{2} \Lambda_0''^{(0)} \left(S_0^{(1)} \right)^2 \right\rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3.
 \end{aligned}$$

Pour calculer le flux mis à l'échelle, la détermination de $S_0^{(1)}$ est également inévitable. Grâce à Eq.(B.18) et $\mathbf{q}_{t,0}^{(0)} = 0$, on déduit :

$$\begin{aligned}
 k_G \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \left[\left(y_k \Lambda_0^{(0)} + S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} \right) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 \right] &= 0 \\
 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial Y_3} \left[\left(y_k \Lambda_0^{(0)} + S_0^{(1)} \Lambda_0'^{(0)} \right) \right] &= 0 \\
 \Rightarrow S_0^{(1)} &= -y_k \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}} + \frac{c}{\Lambda_0'^{(0)}}
 \end{aligned}$$

où c est une constante. Notons que la valeur moyenne de $S_0^{(1)}$ dans tout le domaine s'annule, on déduit donc $c = 0$ car $\langle y_k \rangle = 0$ et $\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}}$ ne dépendent pas de \mathbf{Y}

La saturation $S_0^{(1)}$ se réécrit :

$$S_0^{(1)} = -y_k \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}}. \tag{B.25}$$

Considérons maintenant la vitesse à l'ordre ν^0 (Eq.(B.8)) :

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0}^{(0)} = 0 &\Rightarrow \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \left[\alpha_0^{(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{(0)} g \mathbf{e}_3 \right] = 0 \\ &\Rightarrow \nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{t,0}^{(1)} &= -k_G \left[\alpha_0^{(0)} \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(1)} + S_0^{(1)} \alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + S_0^{(1)} \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right] - y_k \mathbf{q}_{t,0}^0 \\ &= -k_G \left[\alpha_0^{(0)} \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(1)} + S_0^{(1)} \alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + S_0^{(1)} \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right]\end{aligned}$$

$$\nabla_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} = 0 \Rightarrow \alpha_0^{(0)} \nabla_{\mathbf{Y}}^2 p_1^{(1)} - \left\{ \alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right\} \nabla_{\mathbf{Y}} y_k \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} = 0$$

$$\Rightarrow p_1^{(1)} = \chi(\mathbf{Y}) \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)} \alpha_0^{(0)}} \left\{ \alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right\} + \bar{p}_1^{(1)}(\mathbf{X}, t)$$

où χ est la solution du problème local :

$$\begin{cases} \nabla^2 \chi = \nabla_{\mathbf{Y}} y_k \\ \chi \text{ est périodique en } \mathbf{Y} \text{ et } \langle \chi \rangle = 0. \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

$$\Rightarrow \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} = -k_G (\nabla_{\mathbf{Y}} \chi - y_k) \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} \left[\alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right] \quad (\text{B.27})$$

Donc,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle &= -k_G \langle \nabla_{\mathbf{Y}} \chi - y_k \rangle \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} \left[\alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right] \\ &= -k_G \langle \nabla_{\mathbf{Y}} \chi \rangle \frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} \left[\alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right]\end{aligned}$$

Notons que

$$\langle \nabla_{\mathbf{Y}} \chi \rangle = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\Omega} \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{Y}} d\Omega = \frac{1}{\|\Omega\|} \int_{\partial\Omega} \chi \cdot \vec{n} d\partial\Omega = 0,$$

à cause de la périodicité en \mathbf{Y} de χ . Donc, $\mathbf{q}_{t,0}^{(1)}$ vérifie la condition $\langle \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle = 0$.

Incorporant les équations Eq.(B.25) et Eq.(B.27), on déduit :

$$\langle S_0^{(1)} \mathbf{q}_{t,0}^{(1)} \rangle = k_G \langle y_k \nabla_{\mathbf{Y}} \chi - y_k^2 \rangle \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} \right)^2 \left[\alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right]$$

Donc, le flux mis à l'échelle au premier ordre s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle \Phi_0 \rangle &= k_G \Lambda (S_0) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \frac{1}{2} k_G \nu^2 \left\{ \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} \right)^2 \Lambda_0^{\prime\prime(0)} - \Lambda_0^{(0)} \right\} \langle y_k^2 \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \\ &\quad \nu^2 f_0^{\prime(0)} k_G \langle y_k \nabla_{\mathbf{Y}} \chi - y_k^2 \rangle \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0^{\prime(0)}} \right)^2 \left[\alpha_0^{\prime(0)} \left(\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} \right) + \beta_0^{\prime(0)} g \mathbf{e}_3 \right]\end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Compte tenu de

$$\begin{aligned} \alpha_0^{(0)} (\nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)}) + \beta_0^{(0)} g \mathbf{e}_3 &= 0 \\ \Rightarrow \nabla_{\mathbf{X}} p_0 + \nabla_{\mathbf{Y}} p_1^{(0)} &= -\frac{\beta_0^{(0)}}{\alpha_0^{(0)}} g \mathbf{e}_3 \end{aligned}$$

le flux effectif à l'ordre ε^0 s'écrit finalement :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 \rangle &= k_G \Lambda (S_0) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \frac{1}{2} k_G \nu^2 \left\{ \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}} \right)^2 \Lambda_0''^{(0)} - \Lambda_0^{(0)} \right\} \langle y_k^2 \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 - \\ &\quad \nu^2 f_0'^{(0)} k_G \langle y_k \nabla_{\mathbf{Y}} \chi - y_k^2 \rangle \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}} \right)^2 \left[\alpha_0'^{(0)} \frac{\beta_0^{(0)}}{\alpha_0^{(0)}} - \beta_0'^{(0)} \right] g \mathbf{e}_3. \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Donc, l'équation mise à l'échelle à l'ordre ε^0 et ν^2 s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle S_0 \rangle}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \left\{ k_G \Lambda (S_0) \Delta \rho g \mathbf{e}_3 + \frac{1}{2} k_G \nu^2 \left\{ \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}} \right)^2 \Lambda_0''^{(0)} - \Lambda_0^{(0)} \right\} \langle y_k^2 \rangle \Delta \rho g \mathbf{e}_3 - \right. \\ \left. \nu^2 f_0'^{(0)} k_G \langle y_k \nabla_{\mathbf{Y}} \chi - y_k^2 \rangle \left(\frac{\Lambda_0^{(0)}}{\Lambda_0'^{(0)}} \right)^2 \left[\alpha_0'^{(0)} \frac{\beta_0^{(0)}}{\alpha_0^{(0)}} - \beta_0'^{(0)} \right] g \mathbf{e}_3 \right\} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

B.3 Validation du modèle mis à l'échelle

B.3.1 Présentation du cas test

La géométrie étudiée est celle de la colonne présentée en section A.2. Une saturation S_i , et S_i^{hom} sont imposées en bas du milieu hétérogène et homogène équivalent respectivement, ce qui satisfait la condition de continuité du flux $G^m(S_i) = \langle \Phi_0 \rangle (S_i^{hom})$. Le rapport entre la perméabilité des inclusions et celle de la matrice est égal à 0,5. Tous les paramètres et les lois constitutives sont celles de l'annexe A.

B.3.2 Flux gravitaire effectif

Le problème local (B.26) est résolu dans la cellule présentée dans la Figure A.1. La résolution du problème local s'effectue numériquement à l'aide de l'outil *pdetool* de Matlab.

La Figure B.1 montre les variations de la fonction χ , le gradient $\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{Y}}$ ainsi que la fonction $y_k \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{Y}}$ dans la cellule. Ces fonctions nous permettent de calculer le flux effectif à l'ordre ε^0 , $\langle \Phi_0 \rangle$ via l'équation (B.29).

Le flux effectif calculé pour le cas $k^i/k^m = 0,50$ est montré dans la Figure B.2. On note que la courbe de $\langle \Phi_0 \rangle$ est très proche de celle correspondant à la moyenne géométrique de perméabilité k_g , en particulier pour les valeurs $\langle \Phi_0 \rangle$ inférieures au flux maximal dans les inclusions Φ_{max}^i , ce que nous avons également remarqué dans le chapitre 4. Notons S_{max}^i

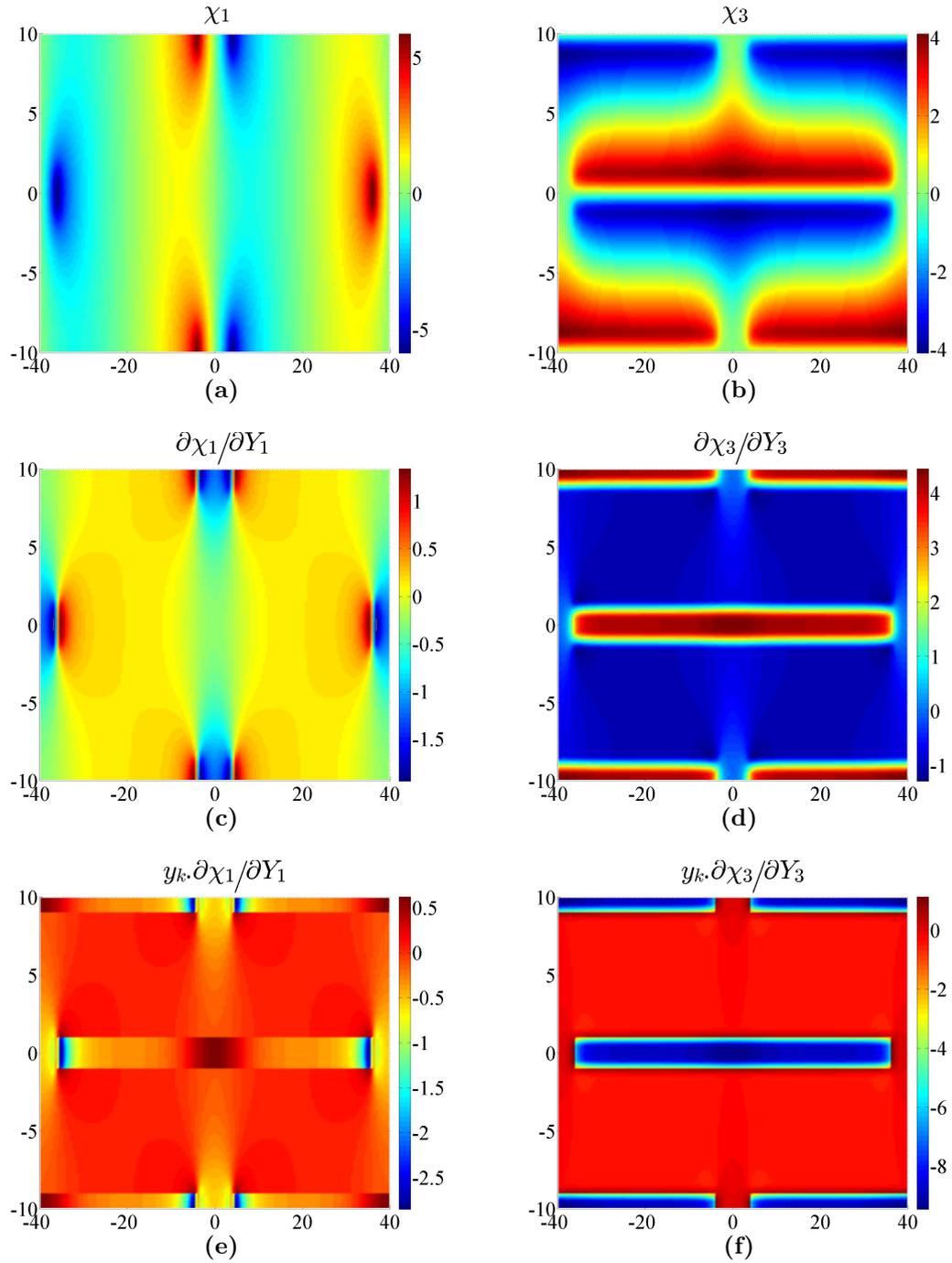


Figure B.1 – Fonction χ_1 (a), χ_3 (b); le gradient $\partial\psi_1/\partial Y_1$ (c) $\partial\psi_3/\partial Y_3$ (d); $y_k \partial\psi_1/\partial Y_1$ (e) et $y_k \partial\psi_3/\partial Y_3$ (f) dans la cellule pour le rapport $k^i/k^m = 0,50$.

et S_{max}^m sont respectivement la saturation pour que le flux atteigne sa valeur maximale dans chacune couche. Comme on utilise les mêmes lois constitutives pour la matrice et les inclusions, on déduit :

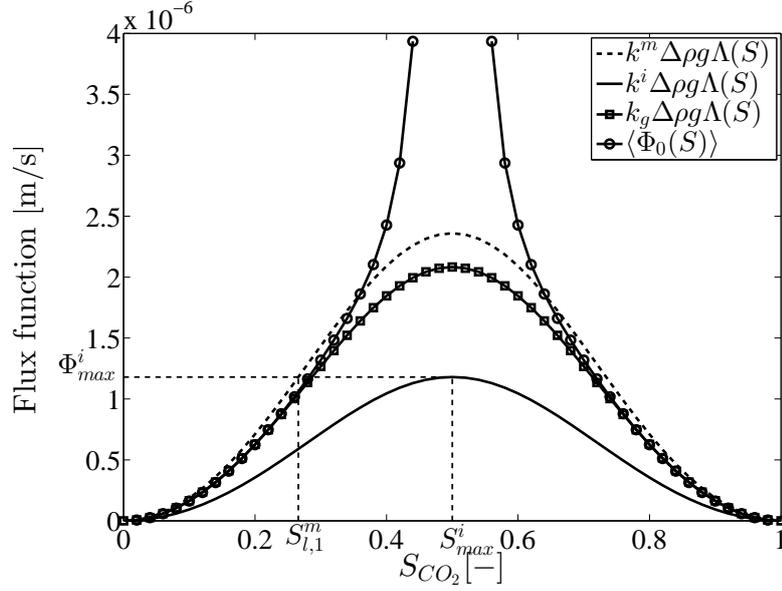


Figure B.2 – Flux gravitaire effectif en fonction de la saturation S_{CO_2} pour le cas $k^i/k^m = 0,50$ ($k^m = 3 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ et $k^i = 1,5 \times 10^{-12} \text{ m}^2$). La saturation pour $G^i(S)$ maximal est $S_{max}^i = 0,50$ et la saturation $S_{l_1}^m$ pour que $G^m(S_{l_1}^m)$ soit égal au flux gravitaire maximal dans l'inclusion Φ_{max}^i est égale à 0,265.

$$S_{max}^i = S_{max}^m = S_{max}.$$

Notons que $\langle \Phi_0 \rangle$ tends vers l'infini lorsque la saturation tends vers la valeur S_{max} car $\Lambda'(S) \rightarrow 0$. Le modèle, basé sur des développements de Taylor des différentes non linéarités, ne peut pas décrire le flux mis à l'échelle quand la saturation est voisine de S_{max} .

B.3.3 Solution du problème macroscopique

Puisque la différence entre la courbe du flux effectif $\langle \Phi_0 \rangle$ et celle associée à la moyenne géométrique de perméabilité $k_g \Delta \rho g \Lambda(S)$ n'est pas très flagrante étudions la vitesse macroscopique de montée de CO_2 dans un milieu homogène équivalent dont la perméabilité est égale à k_g avec la courbe de la saturation moyennée dans chaque cellule et issue de la simulation numérique dans le milieu hétérogène.

B.3.3.1 Résultat des simulations

Considérons dans un premier temps le cas d'une faible saturation imposée, e.g. $S_i = 0,25 < S_{l_1}^m$. La Figure B.3 montre l'évolution temporelle de CO_2 dans la colonne stratifiée périodique. On note qu'aucun courant de gravité n'apparaît sous les inclusions.

Dans un second temps, on considère le cas où la saturation imposée S_i égale à 0,30, valeur supérieure à la saturation $S_{l_1}^m$ mais également éloignée de S_{max} . Notons que dans

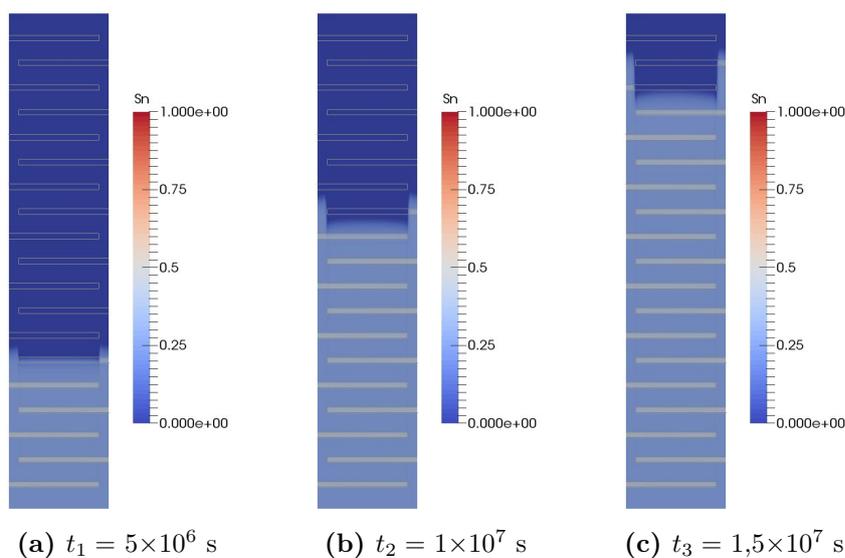


Figure B.3 – Carte de saturation du CO₂ dans la colonne bi-dimensionnelle aux différents temps pour $S_i = 0,25 < S_{l1}^m$. Ici, le temps est le temps réel non-adimensionné.

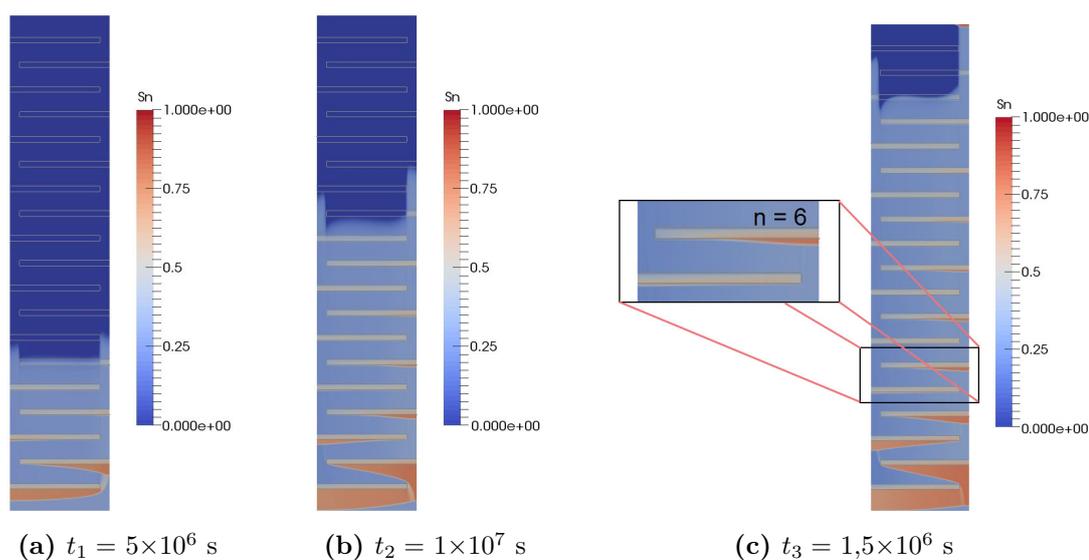


Figure B.4 – Carte de saturation de CO₂ dans la colonne bi-dimensionnelle aux différentes temps pour $S_i = 0,30 > S_{l1}^m$. Le temps n'est pas adimensionné.

le cas d'un écoulement unidimensionnel où la vitesse est absente, la couche la plus imperméable filtre la saturation de CO₂ : l'accumulation se produit sous cette couche mais pas sous les couches plus hautes (Hayek *et al.* (2009)). L'évolution temporelle de CO₂ est présentée dans la Figure B.4 qui montre la stratification de CO₂ sous les inclusions.

Différents phénomènes intéressants sont observés :

(i) Un courant de gravité apparaît sous l'inclusion n (par exemple, $n = 6$ dans le zoom au temps $t = 1,5 \times 10^7$ s), alors qu'il n'est pas alimenté par celui situé sous l'inclusion $n - 1$ (ce dernier n'arrive pas à l'extrémité de l'inclusion $n - 1$).

(ii) Les courants de gravité sous les inclusions impaires, à gauche de la colonne, apparaissent plus tard que sous les inclusions paires, à droite de la colonne.

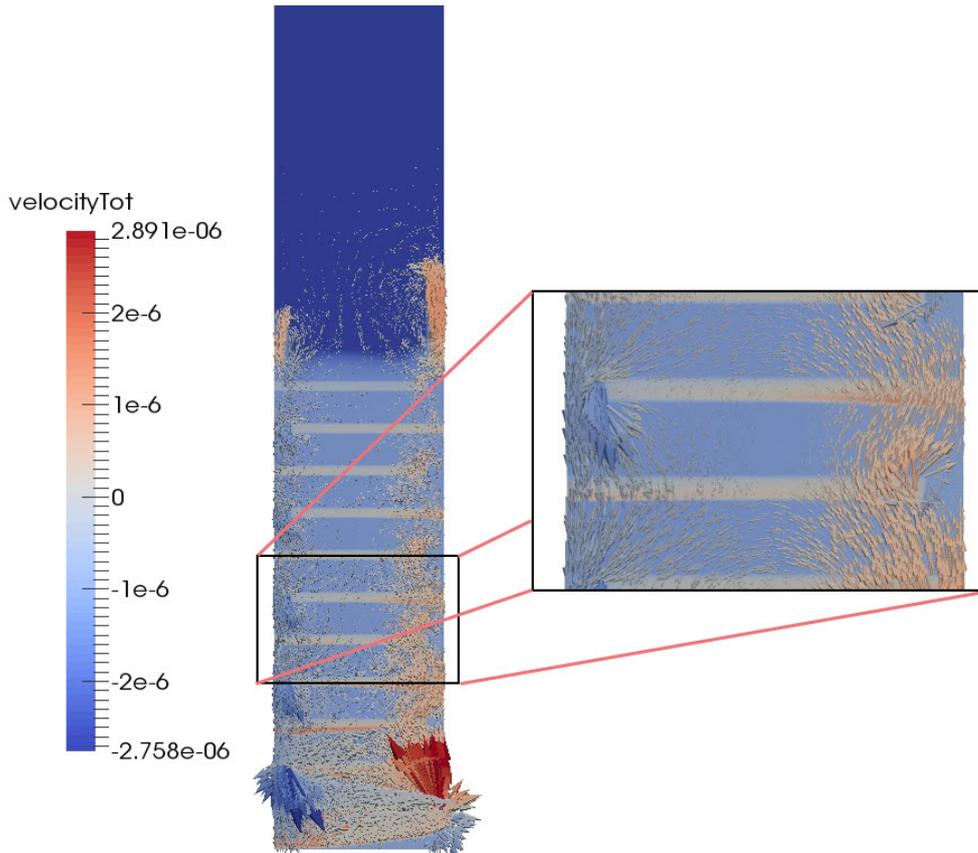


Figure B.5 – Champ de vitesse total pour le cas $S_i = 0,30$ avec un zoom au niveau des inclusions numéro $n = 5$ et $n = 6$.

Pour expliquer ces phénomènes, il faut souligner l'influence de la fluctuation de vitesse. Cette dernière bien que de moyenne nulle dans une cellule peut, en fonction de sa direction, avoir des impacts différents sur la condition de continuité à l'interface du flux normal. Les fluctuations de vitesse totale qui s'orientent vers le bas diminuent le flux total et réciproquement, si elles s'orientent vers le haut, le flux total augmente. La modification du flux total Φ due à la fluctuation de vitesse peut provoquer une discontinuité entre les flux amont (dans la matrice) et aval (dans l'inclusion) au niveau de l'interface, et donc créer des courants de gravité indépendamment de ceux situés plus bas.

La Figure B.5 montre le champ de vitesse total ainsi qu'un zoom sur celui-ci au niveau des inclusions numéro $n = 5$ et $n = 6$ pour le cas $S_i = 0.30$. On constate que le retard

dans l'apparition des courants de gravité sous les inclusions impaires est causé par un faible flux total en amont de l'interface, car la vitesse tend vers le bas.

B.3.3.2 Validation du modèle mis à l'échelle

La Figure B.6 montre une comparaison entre les profils de saturation de CO_2 analytique et numérique dans le milieu hétérogène pour les deux cas $S_i = 0,25$ et $S_i = 0,30$.

On note que pour le cas $S_i = 0,25$, les courbes analytiques et numériques s'accordent assez bien, excepté au voisinage du front. Le modèle rend bien compte de la vitesse de montée du front. Comme dans le cas unidimensionnel, on s'attend à ce que le désaccord au niveau du front s'améliore quand le petit paramètre de développement ε tends à 0.

Pour le cas $S_i = 0,30$, on observe des saturations élevées au niveau des premières cellules dues à l'accumulation de CO_2 sous les inclusions, phénomène qui ne peut pas être décrit par le modèle homogénéisé. L'oscillation sur le profil de saturation dans le milieu hétérogène est expliquée par la variation de l'épaisseur des courants de gravité entre le côté droit de la colonne et le côté gauche, variation induite par la fluctuation de vitesse totale.

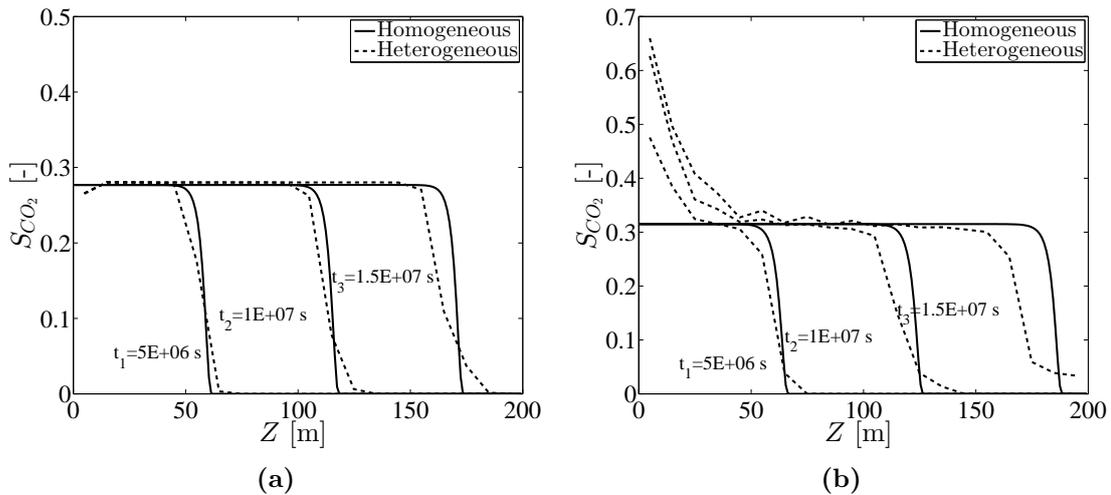


Figure B.6 – Profil de saturation de CO_2 analytique dans un milieu homogène équivalent (continu) et numérique dans le milieu hétérogène (discontinu) pour les cas $S_i = 0,25$ (a) et $S_i = 0,30$ (b).

Ces résultats montrent la validité du modèle mis à l'échelle uniquement dans le cas de faible saturation imposée.

B.4 Conclusion

Nous avons utilisé l'analyse en perturbation pour étudier la montée purement gravitaire du CO_2 dans un milieu faiblement hétérogène en négligeant la capillarité ainsi que la vitesse d'injection. Le modèle analytique obtenu n'est valide que pour le cas où la saturation moyenne est notablement inférieure à la saturation S_{max} correspondant flux

maximal dans la matrice et dans les inclusions. La perméabilité effective est la moyenne géométrique de la perméabilité des sous-domaines. Le modèle homogénéisé développé n'est donc pas capable de rendre compte de la stratification du CO_2 sous les inclusions peu-perméables. Les simulations numériques dans le cas d'une faible saturation imposée, donc en l'absence de courant de gravité, montrent néanmoins que le modèle décrit correctement la solution numérique moyennée dans chaque cellule.

Bibliographie

- AURIAULT, J.-L. et LEWANDOWSKA, J. (1993). Homogenization analysis of diffusion and adsorption macrotransport in porous media : macrotransport in the absence of advection. *Géotechnique*, 43(3):457–469.
- BOLSTER, D., DENTZ, M. et CARRERA, J. (2009). Effective two-phase flow in heterogeneous media under temporal pressure fluctuations. *Water resources research*, 45(5).
- BOLSTER, D., NEUWEILER, I., DENTZ, M. et CARRERA, J. (2011). The impact of buoyancy on front spreading in heterogeneous porous media in two-phase immiscible flow. *Water Resources Research*, 47(2).
- FREYBERG, D. L. (1986). A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer : 2. spatial moments and the advection and dispersion of nonreactive tracers. *Water Resources Research*, 22(13):2031–2046.
- HAN, W. S., LEE, S.-Y., LU, C. et MCPHERSON, B. J. (2010). Effects of permeability on CO₂ trapping mechanisms and buoyancy-driven CO₂ migration in saline formations. *Water Resources Research*, 46(7).
- HAYEK, M., MOUCHE, E. et MÜGLER, C. (2009). Modeling vertical stratification of CO₂ injected into a deep layered aquifer. *Advances in Water Resources*, 32(3):450 – 462.
- LEWANDOWSKA, J., SZYMKIEWICZ, A., BURZYŃSKI, K. et VAUCLIN, M. (2004). Modeling of unsaturated water flow in double-porosity soils by the homogenization approach. *Advances in Water Resources*, 27(3):283–296.
- MOUCHE, E., HAYEK, M. et MÜGLER, C. (2010). Upscaling of CO₂ vertical migration through a periodic layered porous medium : The capillary-free and capillary-dominant cases. *Advances in Water Resources*, 33(9):1164 – 1175.
- NEUWEILER, I., ATTINGER, S., KINZELBACH, W. et KING, P. (2003). Large scale mixing for immiscible displacement in heterogeneous porous media. *Transport in Porous Media*, 51(3):287–314.
- PANFILOV, M. et FLORIAT, S. (2004). Nonlinear two-phase mixing in heterogeneous porous media. *Transport in porous media*, 57(3):347–375.
- SZYMKIEWICZ, A., HELMIG, R. et KUHNKE, H. (2011). Two-phase flow in heterogeneous porous media with non-wetting phase trapping. *Transport in porous media*, 86(1):27–47.
- TOMPSON, A. F. et GELHAR, L. W. (1990). Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 26(10):2541–2562.