

Modélisation Numérique de l'Injection du CO₂ dans le contexte de la séquestration géologique

S. Bouzgarrou¹, H.-S. Harzallah², H. Jadli³, K. Slimi⁴,

¹ *Unité de recherché énergétique et environnement, Ecole Nationale d'Ingénieurs de Tunis, Tunisie*

^{2,3} *Laboratoire des Etudes des Systèmes Thermiques, Ecole Nationale d'Ingénieurs de Monastir Tunisie*

⁴ *Institut Supérieur de Transport et de la Logistique de Sousse, Tunisie.*

¹souhailbouzgarrou@yahoo.fr_

²h2souheil@hotmail.com_

³jedli.hedi@yahoo.com

⁴khalifa_slimi@yahoo.fr

Résumé—Dans ce travail, nous visons à étudier numériquement le stockage du CO₂ avec les conditions supercritiques, dans les réservoirs aquifères salins profonds. Des simulations numériques ont été réalisées sur un matériau poreux, indéformable, saturé à l'intérieur d'une enceinte verticale, supposée imperméable et isolée sur ces côtés. Le milieu poreux est considérée comme homogène et isotrope avec des propriétés thermo-physiques constantes, à l'exception de la densité du fluide variant selon les approximations de Boussinesq.

Le modèle dynamique établi suppose que l'écoulement est bidimensionnel et obéit à la loi de Darcy. On suppose également que l'hypothèse de l'équilibre thermique local est valable. L'ensemble des équations de conservation ainsi que les conditions initiales et aux limites appropriées ont été résolues numériquement par la méthode des volumes finis classique [1]. Les variations spatio-temporelles des différentes variables d'état telles que la pression, la vitesse, la température et la concentration ont été simulées numériquement et tracées en fonction des différents paramètres de contrôle, notamment les nombres de Rayleigh thermique, Rayleigh solutal et Lewis. Une grande attention a été accordée à l'étude de la sensibilité des taux de transfert de chaleur et de masse en fonction des conditions opératoires.

MOTS CLES: Convection naturelle, double diffusion, milieu poreux, stockage, CO₂.

I. INTRODUCTION

La séquestration géologique du CO₂ supercritique dans des aquifères salins profonds est apparue comme une solution techniquement prometteuse pour réduire les émissions de gaz à effet de serre. L'efficacité de cette technique dépend notamment du taux de transfert dans les aquifères, de la solubilité du CO₂ et son potentiel de séquestration sous forme résiduelle ou par minéralisation sous forme de structure carbonatés. Le problème de séquestration du CO₂ dans des aquifères

salins profonds a fasciné plusieurs chercheurs, voir à titre d'exemple, [2-4].

Le principal objectif de cette étude consiste à simuler numériquement le stockage du CO₂ en phase supercritique dans des aquifères salins profonds. Le CO₂ en phase gazeuse est injecté par la face supérieure d'un milieu poreux saturé d'un fluide en phase liquide (typiquement de l'eau). La convection naturelle en milieu poreux, due à la flottabilité thermique seule, a été largement étudiée [5, 6] et bien documentée dans la littérature [7-10]. La convection naturelle double diffusive se produit fréquemment dans les écoulements de L'eau de mer et les écoulements dans la croûte terrestre, ainsi que dans de nombreuses applications d'ingénierie. Ce type de convection concerne les processus de transferts combinés de chaleur et de masse induits par les variations de densité dues aux gradients de concentration et de température.

II. MODÈLE MATHÉMATIQUE

A. Equations de conservation

Les équations de conservation régissant l'écoulement du fluide et les transferts de chaleur et de masse à l'intérieur du milieu poreux sont écrites sous forme adimensionnelle sur la base des échelles suivantes [11]:

$$L_{ref} = L; V_{ref} = \frac{\alpha}{L}; P_{ref} = \frac{\mu\alpha}{k}; t_{ref} = \frac{L^2}{\alpha}; \Delta T_{ref} = T_0 - T_i; \Delta C_{ref} = C_0 - C_i \quad (2)$$

Les variables adimensionnelles sont Choiesies comme suit :

$$(x, z) = \left(\frac{x}{L_{ref}}, \frac{z}{L_{ref}} \right); (u, v) = \left(\frac{u}{V_{ref}}, \frac{v}{V_{ref}} \right); \tau = \frac{t}{t_{ref}}; \Pi = \frac{P}{P_{ref}}; \theta = \frac{T - T_i}{\Delta T_{ref}}; c = \frac{C - C_i}{\Delta C_{ref}} \quad (3)$$

Par conséquent, les équations régissant l'écoulement et les transferts de chaleur et de masse régissant le problème étudié sont écrites en coordonnées cartésiennes et sous une forme adimensionnelle comme suit:

Équation de continuité

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

Loi de Darcy

$$u = -\frac{\partial \Pi}{\partial x} \quad (5a)$$

$$v = -\frac{\partial \Pi}{\partial z} + Ra_T \theta - Ra_S \quad (5b)$$

En substituant les équations 5(a-b) dans l'équation 4, on obtient ce qu'on appelle « équation de Poisson pour la pression »:

$$\frac{\partial^2 \Pi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial z^2} = Ra_T \frac{\partial \theta}{\partial z} - Ra_S \frac{\partial c}{\partial z} \quad (6)$$

Equation de conservation de l'énergie

$$\gamma \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (7)$$

Equation de conservation de la concentration

$$\delta \frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\delta}{Le} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (8)$$

Ou $Ra_T = \frac{kg\beta_T L \Delta T_{ref}}{\nu \alpha}$ est le nombre de Rayleigh thermique modifié; $Ra_S = \frac{kg\beta_C L \Delta C_{ref}}{\nu \alpha}$ est le nombre de Rayleigh solutal modifié; $Le = \frac{\alpha}{D_C}$ est le nombre de Lewis, $\gamma = \frac{(\rho c_p)_{eff}}{(\rho c_p)_f}$ est le rapport de capacité calorifique et $A = \frac{H}{L}$ est le rapport de forme de l'enceinte.

A. Conditions initiales et aux limites

Initialement (i. e. à $\tau=0$), le milieu est au repos et en état d'équilibre thermique et il n'y a pas de CO₂ présent à l'intérieur du domaine:

$$\Pi(x, z, 0) = 0; c(x, z, 0) = 0; \theta(x, z, 0) = 0; \quad (9)$$

À la face supérieure du domaine situé à $z=A$, le CO₂ est injecté à une température et concentration fixées avec une haute pression :

$$\Pi(x, A, \tau) = \Pi_0, c(x, A, \tau) = 1; \theta(x, A, \tau) = 1, \quad (10a)$$

La face verticale gauche est supposée imperméable et isolée:

$$u(0, z, \tau) = 0; \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{0, z, \tau} = 0; \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{0, z, \tau} = 0 \quad (10b)$$

La face verticale droite est supposée imperméable et isolée:

$$u(1, z, \tau) = 0; \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{1, z, \tau} = 0; \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{1, z, \tau} = 0 \quad (10c)$$

Au fond à l'interface $z=0$, on suppose qu'il n'y a pas d'écoulement.

$$u(x, 0, \tau) = 0; v(x, 0, \tau) = 0; \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{x, 0, \tau} = 0; \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x, 0, \tau} = 0 \quad (10d)$$

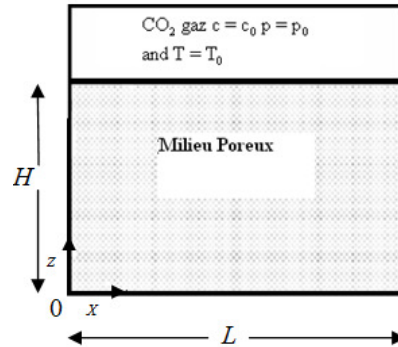


Fig. 1 Modèle physique et système de coordonnées.

A. Solution numérique

La méthode des volumes finis [1] a été utilisée pour résoudre numériquement le système d'équations régissant le problème couplé aux conditions initiales et aux limites associées. Un schéma en loi de puissance a été utilisé pour discrétiser les termes de convection-diffusion, et le schéma implicite a été utilisé pour la discrétisation des termes d'accumulation. Le système d'équations discrétisées obtenu est résolu numériquement en se basant sur l'algorithme de matrice tri-diagonale avec un balayage ligne par ligne.

Un maillage régulier de 81x81 nœuds a été choisi comme un compromis entre la précision, la stabilité et le temps de calcul.

$$c(x, A, \tau = 0) = 1 + A_0 \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) \quad (11)$$

Ou $A_0=0.01$ et $\lambda=1/12$. [4]

En réalité, les fluctuations sont causées par des fluctuations thermodynamiques, voir [12, 13], et par des perturbations au niveau des pores. Nous ignorons pour l'instant l'instabilité au niveau des pores, voir, toutefois, [14, 15].

Nous observons qu'après un certain temps, le nombre de doigts est inférieur au nombre de périodes de la perturbation initiale. Cependant, lorsque nous avons ajouté l'effet de la température, il a été montré que le taux de croissance des perturbations est une fonction faible de la longueur d'onde. Par conséquent, il y aura une certaine ténacité du comportement initial et la tendance observée persiste pendant un certain temps

avant que le nombre de doigts commence à diminuer et commence à indiquer une diffusion transversale plus intense.

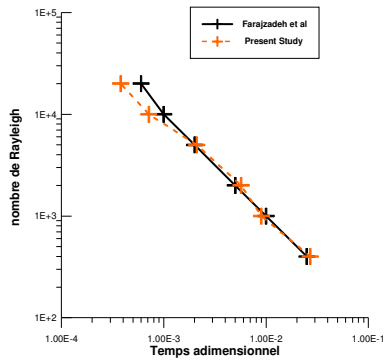


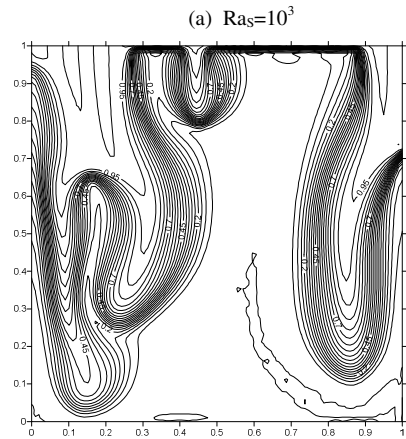
Fig .2 Le temps nécessaire pour que la concentration de CO₂ atteint 0.1C₀ au fond du domaine pour la première fois pour différentes valeurs de Rayleigh solutal, Ra_S [2]

III. RÉSULTATS ET DISCUSSION

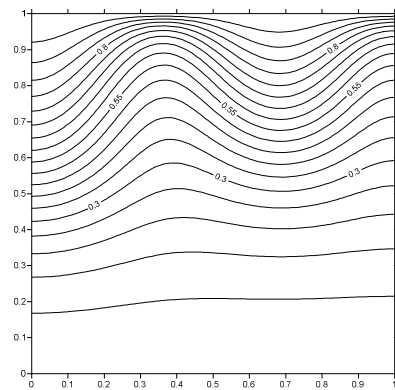
Toutes les simulations numériques présentées ici sont réalisées avec un rapport de forme, A=1, une porosité moyenne, δ=0,4, un rapport de capacités thermiques, γ=0,42. Les valeurs des nombres de Rayleigh thermique, solutal et de Lewis variant dans les gammes suivantes:

$$10^2 \leq Ra_T \leq 10^4; 10^2 \leq Ra_S \leq 10^4; 10^{-2} \leq Le \leq 10^3; 0.5 \leq A \leq 2$$

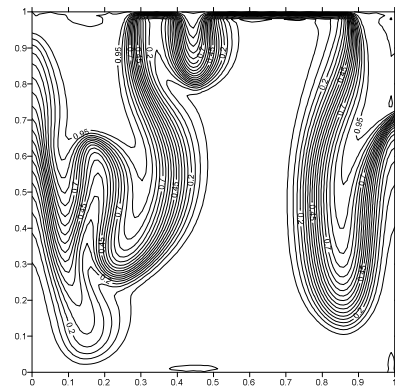
En s'inspirant du travail de Farajzadeh et al. [2], nous avons tracé, pour différents valeurs de Ra_S, le temps nécessaire pour atteindre, pour la première fois, 0.1C₀ au fond de l'enceinte. Comme on peut le constater d'après la figure 2, il y a un accord satisfaisant entre nos résultats et ceux obtenus par Frajzadeh et al. [2] dans le cas où la convection naturelle est engendrée par les variations de densité dues aux gradients de concentration seulement. On peut conclure aussi que le temps requis par le système pour atteindre 0.1C₀ pour la première fois au fond devient de plus en plus faible lorsque le nombre de Rayleigh solutal augmente.



(a) Ra_S=10³



(b) Ra_S=10²



(a) Ra_S=10²

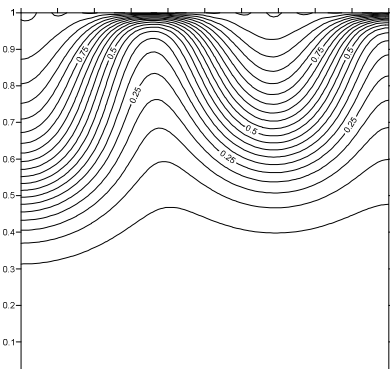
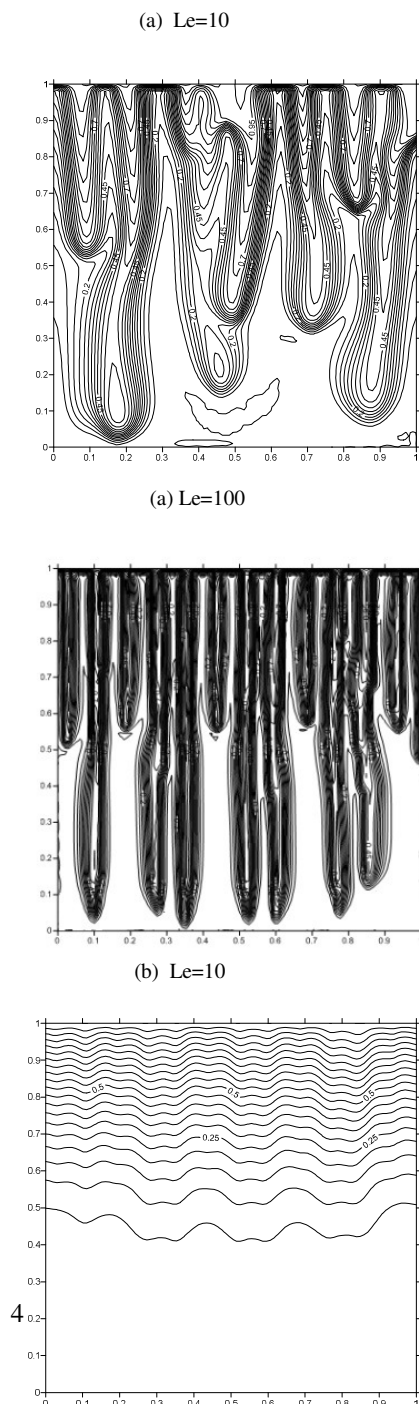


Fig .3 contours d' iso-concentration(a), et isothermiques (b) pour différent nombre de Rayleigh solutal avec: $Ra_T=10^2$, $Le=1$ et $A=1$, lorsque la concentration tends vers $0.1C_0$ au fond du domaine.

Figure 3 presente les iso-concentrations, et les isothermes pour différentes valeurs de nombre de Rayleigh solutal et lorsque la concentration se rapproche de $0.1C_0$ au fond du domaine pour la première fois. on peut constater, que les champs de température et de concentration sont fortement reliés selon le nombre de Rayleigh solutal. L'augmentation du Ra_S conduit à des changements remarquables de la température, ainsi que dans les profils de concentration principalement au voisinage de la surface supérieure à partir de laquelle le CO_2 est injecté. En outre, le milieu est de plus en plus chauffé quand Ra_S augmente. Ainsi le CO_2 se propage bien dans le milieu indiquant que la diffusion de masse est croissante.



(b) Le=100

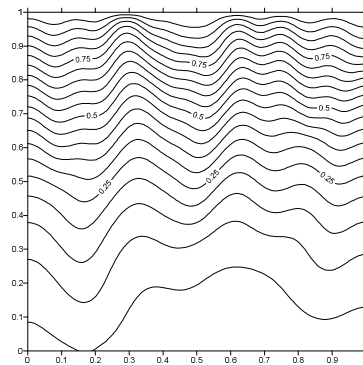


Fig. 4 contours d' iso-concentration(a), et isothermiques(b) pour différents valeurs de Lewis avec: $Ra_T = Ra_S = 10^2$, et $A=1$, lorsque la concentration tends vers $0.1C_0$ au fond du domaine

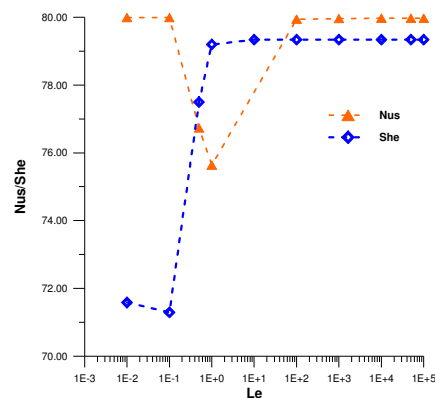


Fig.5 Variation du nombre de Nusselt et nombre de Sherwood en fonction du nombre de Lewis, avec: $Ra_S=Ra_T=10^2$, et $A=1$, quand la concentration atteint $0.1C_0$ au fond du domaine pour la première fois.

Nous avons étudié la stabilité en imposant des petites perturbations initiales. Cette idée provenant de la méthode de décomposition en mode normal, est une méthode analytique étudiant la stabilité d'un système d'équations suite à une infinité de petites perturbations. Cette idée émane du fait que toute perturbation peut être décomposée en composantes de Fourier. Nous

commençons par une perturbation ondulée sur la face supérieure de l'interface.

On peut constater d'après la figure 5 que le nombre de Sherwood augmente brusquement lorsque le nombre de Lewis augmente dans l'intervalle 0,1 à 1, pour atteindre une valeur constante lorsque le nombre de Lewis dépasse la valeur 1. Le profil de Nusselt présente une valeur minimal lorsque Lewis égal à 1, pour les valeurs autour de 1 c.a.d $Le < 1$ ou $Le > 1$, le nombre de Nusselt moyen devient constant et insensible aux valeurs de Lewis.

La figure 6 donne les profils du nombre moyen de Nusselt et Sherwood en fonction du rapport de forme pendant des durées différentes et lorsque la concentration atteint 0.1CO au fond du domaine pour la première fois. Il en ressort que les deux courbes se superposent. En outre, le nombre de Nusselt et Sherwood dépendent fortement du rapport d'aspect, A. Plus ce rapport est élevé, plus les valeurs de Nusselt et Sherwood diminuent.

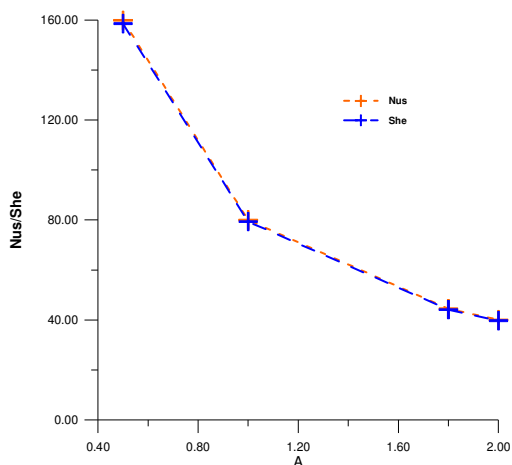


Fig.6 Profils de Nusselt et Sherwood en fonction du rapport de forme A, pour $Ra_T = Ra_S = 10^4$, $Le = 1$ et quand la concentration atteint 0.1CO au fond du domaine pour la première fois.

L'effet de la température est remarquable et il favorise la diffusion massique latérale dans le domaine. On peut constater aussi que le transfert massique du CO₂ dans la direction longitudinale est de plus en plus intense lorsque le rapport de forme augmente. En outre l'évolution de doigté est plus importante lorsqu'on tient compte de l'effet thermique.

IV. CONCLUSIONS

Dans ce travail, nous avons étudié le problème de la convection naturelle instationnaire double diffusive dans une enceinte poreuse dont la partie supérieure est exposé au CO₂ en phase supercritique. Les autres

parois de l'enceinte sont supposées être imperméables et adiabatiques.

Nous avons développé un modèle théorique ainsi qu'un code de calcul capable de simuler ce type de problème. Les simulations numériques ont permis de déterminer les évolutions spatio-temporelles des différents variables d'état.

Les principaux résultats indiquent que lorsque les deux nombre de Rayleigh solutal et de Lewis augmentent pour certains intervalles, la convection naturelle s'intensifie. L'effet de la température influe aussi sur la diffusion de masse dans le domaine. On peut également conclure que la diffusion dans la direction transversale devient plus important lorsque ces nombres augmentent. En outre, le comportement en doigté du transfert est plus prononcé si l'on tient compte de l'effet thermique.

Les résultats de la simulation du CO₂ montrent que le comportement non-linéaire de l'écoulement est fortement dépendant du nombre de Rayleigh solutal, du nombre de Lewis et du facteur de forme du domaine.

Références

- [1] S.V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, New York, 1980.
- [2] Farajzadeh, R.; Salimi, H.; Zitha, P. L. J.; Bruining, J. Numerical simulation of Density-Driven Natural Convection with Application for CO₂, Int. J. Heat and Mass transfer 2007.
- [3] R. Farajzadeh, P. L. J. Zitha, and J. Bruining, Enhanced transport phenomena in CO₂ sequestration Ind. Eng. Chem. Res. 2009, 48, 6423–6431
- [4] R Farajzadeh, F Farshbaf Zinati, P L J Zitha, J Bruining 2008 Density-driven Natural Convection in Dual Layered and Anisotropic Porous Media with Application for CO₂ Injection Projects In: 11th European Conference on the Mathematics of Oil.
- [5] Mathematics in Oil Recovery (ECMOR X1), Bergen, Norway, 8-11 September 2008.
- [6] C.W. Park, S. Gorell and G.M. Homsy, J. Fluid Mech., 141, (1984) 275.
- [7] Amahmid A., Hasnaoui M., Mamou M., and Vasseur P. On the transition between aiding and opposing double diffusive flows in a vertical porous matrix. J. Porous Media 3: 123–137, 2000.
- [8] Beji H., Bennacer R., Duval R., and Vasseur P. Double diffusive natural convection in a vertical porous annulus. Numer. Heat Transfer, part A 36: 153–170, 1999.
- [9] Benhadji K. and Vasseur P. Double diffusive convection in a shallow porous cavity filled with no-Newtonian fluid. Int. Commun. Heat Mass Transfer 28(6): 763–772, 2001.
- [10] Bennacer R., Beji H., Duval R., and Vasseur P. The Brinkmann model for thermosolutal convection in a vertical annular porous layer. Int. Commun. Heat Mass Transfer Vol. 27, Issue 1, pp. 69-80, 2000.

- [11] Slimi K, A two-temperature model for predicting heat and fluid flow by natural convection and radiation within a saturated porous vertical channel, *Journal of Porous Media* 12(1), 43-63, 2009.
- [12] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics: Course of Theoretical Physics*, Volume 5, 2en revised English Ed., Pergamon Press 1969.
- [13] R. D. Gunn, W. B. Krantz, SPE 6735-PA 1980.
- [14] Y. C. Yortsos, B. Xu and D. Salin, *Physical Review Letters*, Vol 79, No. 23, 1997.
- [15] M. Parlar, Y. C. Yortsos, SPE 16969, 1987.