



HAL
open science

Modèle hydromécanique à trois échelles du gaz de houille intégrant les phénomènes multiphysiques de l'échelle moléculaire à l'échelle du réservoir

Quoc Dat Ha, Tien Dung Le, Irina Panfilov, Christian Moyne

► To cite this version:

Quoc Dat Ha, Tien Dung Le, Irina Panfilov, Christian Moyne. Modèle hydromécanique à trois échelles du gaz de houille intégrant les phénomènes multiphysiques de l'échelle moléculaire à l'échelle du réservoir. 25e Congrès Français de Mécanique, Aug 2022, Nantes, France. hal-04280152

HAL Id: hal-04280152

<https://hal.science/hal-04280152>

Submitted on 10 Nov 2023

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.

Modèle hydromécanique à trois échelles du gaz de houille intégrant les phénomènes multiphysiques de l'échelle moléculaire à l'échelle du réservoir

Q. D. Ha^a, T. D. Le^a, I. Panfilov^a, C. Moyne^a

a. Université de Lorraine, CNRS, LEMTA, F-54000 Nancy, France

quoc-dat.ha@univ-lorraine.fr

tien-dung.le@univ-lorraine.fr

irina.panfilova@univ-lorraine.fr

christian.moyne@univ-lorraine.fr

Résumé

Ce travail vise au développement d'un modèle à trois échelles de gaz de houille basé sur la technique d'homogénéisation. L'effet d'une injection de CO₂ dans la veine de charbon pour améliorer la performance de la production est simulé. Un modèle sophistiqué à trois échelles est développé permettant de prendre en compte la complexité du milieu liée au phénomène d'adsorption dans les nanopores et au comportement élastique non linéaire des fractures ainsi que la compétition entre CH₄ et CO₂ dans le charbon. L'adsorption de CO₂ décrit à l'échelle moléculaire peut causer le gonflement de la matrice et entraîner une réduction de la perméabilité du réservoir.

Mots clefs : Adsorption, Poromécanique, Homogénéisation

1 Introduction

Un réservoir de Coal Bed Methane (CBM) peut être considéré comme un milieu à double porosité avec un réseau de fractures naturelles (cleats) séparant une matrice contenant une phase solide et des nanopores (de taille inférieure à 2 nm) dans lesquels le méthane est adsorbé. Pour accélérer la production du méthane, du CO₂ peut être injecté dans la veine de charbon. L'adsorption plus facile du CO₂ va libérer le CH₄ adsorbé.

Ce travail vise à construire une simulation du réservoir fondée sur une approche multiéchelle allant de l'échelle nanoscopique à l'échelle macroscopique. A l'échelle nanoscopique pour décrire les effets dus à l'adsorption des gaz, une description moléculaire et une approche par la mécanique statistique sont retenues. Les profils de densité du mélange des fluides confinés dans un nanopore fermé sont calculés dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT) et de la Théorie Fondamentale de la Mesure (FMT) [4]. Une nouvelle méthode proposée récemment par notre équipe permet de calculer la distribution des gaz dans une géométrie arbitraire de nanopores. Cette méthode est basée sur une discrétisation spatiale 3D en voxels et la performance des calculs est accélérée par application de la transformation de Fourier rapide [1].

L'adsorption du CO_2 et la désorption du CH_4 ont un effet mécanique sur la phase solide du milieu à travers la force d'attraction/répulsion exercée par les molécules de fluide sur la paroi solide, dénommée force de solvation. Ceci provoque un gonflement/dégonflement de la matrice. La méthode de l'homogénéisation périodique permet de passer de l'échelle du pore à l'échelle microscopique et d'obtenir la réponse de la matrice de charbon. Le modèle poroélastique de Biot est modifié par l'introduction de la force de solvation, qui agit comme principal facteur de gonflement/dégonflement de la matrice et dont la magnitude est beaucoup plus élevée que la pression d'équilibre. Dans cette procédure d'homogénéisation, les équations moyennes de conservation des deux gaz (CH_4 et CO_2) dans la matrice prennent en compte les phénomènes d'adsorption caractérisés par un coefficient de partage et une diffusion effective de type Knudsen. La seconde homogénéisation vise à obtenir la loi macroscopique à l'échelle du réservoir en utilisant une cellule composée de la matrice et des cleats. Dans les cleats de taille submillimétrique (contenant de l'eau résiduelle) le transport du mélange des deux gaz est gouverné par une combinaison la loi de Darcy et de la loi de Fick [2]. La cohésion de l'interface matrice-cleats est déterminée en utilisant la formulation semi-empirique proposée par Barton-Bandis (BB) liant la déformation des interfaces aux contraintes qui y sont appliquées [3]. Cette modification de l'interface va affecter la rigidité effective ainsi que la perméabilité du réservoir. Des équations moyennes macroscopiques permettent de combiner la diffusion des gaz dans la matrice et leur transport dans les cleats en considérant l'échange de masse entre la matrice et les cleats.

2 Couplage Hydromécanique

2.1 Poromécanique non-classique

Le modèle poromécanique proposé prend en compte la force de solvation. Cette force issue de l'interaction solide-fluide est gouvernée par un potentiel de Lennard-Jones contenant simultanément une partie attractive à longue distance et une partie répulsive à courte distance. De plus, elle dépend essentiellement de la distribution des molécules de gaz à l'intérieur des nanopores. La figure (1a) représente

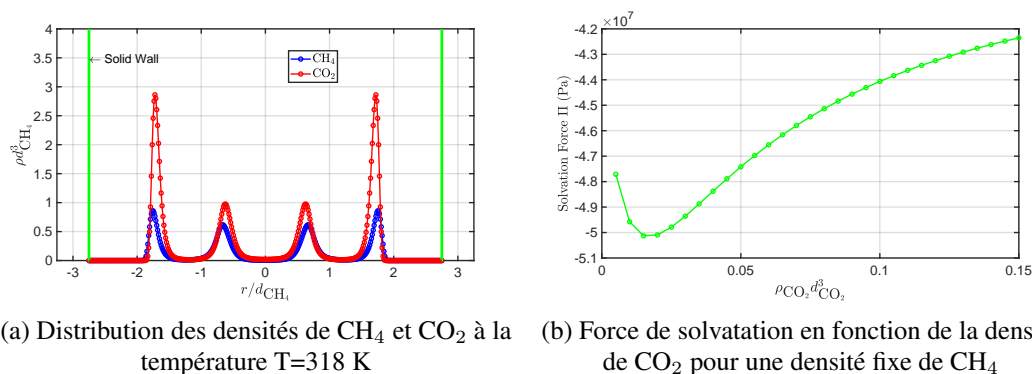


FIGURE 1 – Profil de la force de solvation et des densités des gaz

les profils de densités de CH_4 et de CO_2 confinés dans une cavité sphérique de rayon $R = 5.5 d_{\text{CH}_4}$ à la température $T = 318$ K. Les molécules de CO_2 localisées préférentiellement au voisinage de la paroi abaissent la quantité de CH_4 adsorbée car le potentiel d'interaction fluide/paroi est plus élevé pour CO_2 que pour CH_4 . Connaissant les densités de gaz dans un pore déterminées en utilisant la DFT, on est capable de calculer la force de solvation Π représentée sur la figure (1b) où l'on fait varier la densité de CO_2 en gardant une densité constante de CH_4 . En raison de la dominance de cette force par rapport à la

pression totale de la matrice $p_m = \sum_{i=1}^N p_{m,i}$, l'évolution de Π va décider le gonflement/dégonflement de la matrice. Pour les petites densités de CO_2 , le gaz exerce une traction (valeurs négatives) croissante sur les parois solides tendant à fermer le nanopore. Puis, après être passée par un extremum, cette traction diminue en valeur absolue quand la densité de CO_2 augmente. Cette relaxation de la traction va conduire alors à un gonflement de la matrice.

Après homogénéisation, l'équation pour la matrice est donnée, pour prendre en compte les non-linéarités, sous forme incrémentale :

$$d\sigma_m = \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{du}) - \sum_{i=1}^N \alpha_{m,i}^* dp_{m,i} \mathbf{I} \quad \text{avec} \quad \alpha_{m,i}^* = \alpha_m \left(1 + \frac{\partial \Pi}{\partial p_{m,i}} \right)$$

Notons que la force de solvation Π contribue à modifier très significativement le terme de Biot. Le coefficient apparent $\alpha_{m,i}^*$ pourra dès lors avoir des valeurs plus grandes que l'unité qui est la limite théorique de la poroélasticité pour une phase solide incompressible.

L'objectif est maintenant d'homogénéiser la matrice avec le réseau de cleats. A l'interface matrice-cleat, le contact entre les deux surfaces opposées est gouverné par la loi de Barton-Bandis qui agit sur la rigidité du réservoir [3]. Finalement, l'équation pour la contrainte totale est obtenue conjointement avec la variation de la porosité des cleats à l'échelle du réservoir en supposant que la pression partielle du gaz i dans la matrice $p_{m,i}$ est égale à celui dans les cleats $p_{f,i}$ ($i = 1, \dots, N$).

$$\begin{cases} d\sigma^T &= \mathbf{C}^{eff} : \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{du}) - \alpha_i^T dp_{f,i} \\ d\phi_{cleat} &= -\langle \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}_y(\boldsymbol{\eta}) \rangle : \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{du}) - \langle \nabla_y \cdot \boldsymbol{\eta} \rangle \sum_{i=1}^N (\alpha_f - \alpha_{m,i}^*) dp_{f,i} \end{cases}$$

où $\alpha_i^T = \alpha_{m,i}^* \mathbf{I} - \langle \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}_y(\boldsymbol{\eta}) \rangle (\alpha_f - \alpha_{m,i}^*)$ est nommé coefficient global de Biot et α_f est le coefficient de Biot des cleats. L'indice inférieur x représente la variable spatiale à l'échelle macroscopique du réservoir tandis que l'indice y correspond à l'échelle de la cellule unité. La fermeture ci-dessus contient une fonction auxiliaire périodique $\boldsymbol{\eta}$ définie sur une cellule unité Y où la matrice Y_m est divisée en diverses parties par le réseau de cleats $\partial Y_{m,f}$:

$$\begin{cases} \nabla_y \cdot [\mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}_y(\boldsymbol{\eta})] &= 0 & \text{dans } Y_m \\ \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}_y(\boldsymbol{\eta}^+) \cdot \mathbf{n}^+ &= \mathbf{C}_m : \boldsymbol{\varepsilon}_y(\boldsymbol{\eta}^-) \cdot \mathbf{n}^+ \\ &= K_n[[\boldsymbol{\eta}_n]] + K_\tau[[\boldsymbol{\eta}_\tau]] - \mathbf{n}^+ & \text{sur } \partial Y_{m,f} \end{cases}$$

avec $[[\boldsymbol{\eta}_n]] = \mathbf{n}^+ (\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\eta}^+ + \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\eta}^-)$ et $[[\boldsymbol{\eta}_\tau]] = \boldsymbol{\eta}^+ - \boldsymbol{\eta}^- - [[\boldsymbol{\eta}_n]]$. Le problème auxiliaire pour $\boldsymbol{\eta}$ montre la discontinuité du déplacement à l'interface matrice-cleats avec un saut normal $[[\boldsymbol{\eta}_n]]$ et un saut tangentiel $[[\boldsymbol{\eta}_\tau]]$ qui dépendent des rigidités des cleats $\{K_n, K_\tau\}$. Pour le comportement du milieu obéissant à la loi de BB, la figure (2) donne la variation de la porosité des cleats ϕ_{cleat} en fonction de la pression de CO_2 sans prendre en compte le terme $\boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{du})$. ϕ_{cleat} diminue d'abord rapidement puis ralentit pour atteindre une valeur asymptotique qui ne dépend plus alors de la pression de CO_2 . Ceci est dû à l'augmentation des rigidités des cleats qui suivent la loi de BB.

2.2 Réduction de la perméabilité

La densité moyenne des gaz adsorbés dans les nanopores d'une taille de quelques diamètres de molécule est plus grande que la densité de bulk à la même pression d'équilibre. Cela explique la quantité de méthane contenue dans la veine de charbon ainsi que la capacité de stockage du CO_2 dans les réservoirs

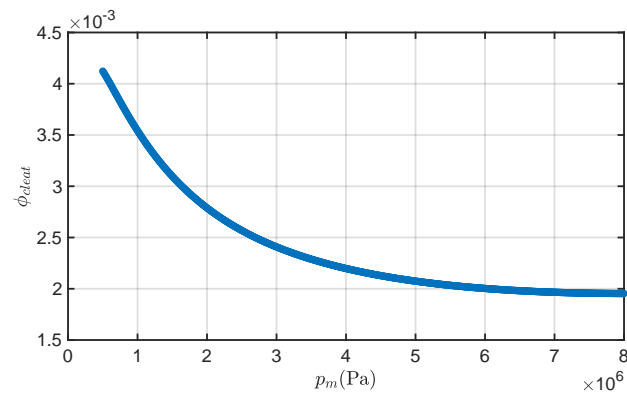


FIGURE 2 – Variation de la porosité des cleats en utilisant la loi de BB pour le cas de CO₂ pur

profonds. En ce qui concerne le transport des gaz, une première étape vise à homogénéiser les équations de conservation de CH₄ et CO₂ dans la matrice avec une diffusion de type Knudsen. L'adsorption introduit dans ces équations un coefficient de partition, égal à la proportion entre la quantité moyenne de gaz adsorbés et celle de gaz libres. Ensuite, la seconde étape consiste en l'homogénéisation des équations précédentes en combinant la diffusion des gaz dans la matrice et leur transport dans des cleats gouvernés par les lois de Darcy et de Fick pour obtenir les équations de transport macroscopiques. L'échange de masse entre la matrice et les cleats est décrite au travers d'un facteur de forme pour le transfert dans l'approximation de Warren et Root. La fermeture des équations macroscopiques abordée par Le et al. [2] est désormais couplée avec la variation non linéaire de la porosité des cleats induite par la loi de BB décrite dans la partie précédente. Le modèle utilise des équations d'état des gaz réels car leurs facteurs de compressibilité sont éloignés de 1 surtout pour le CO₂.

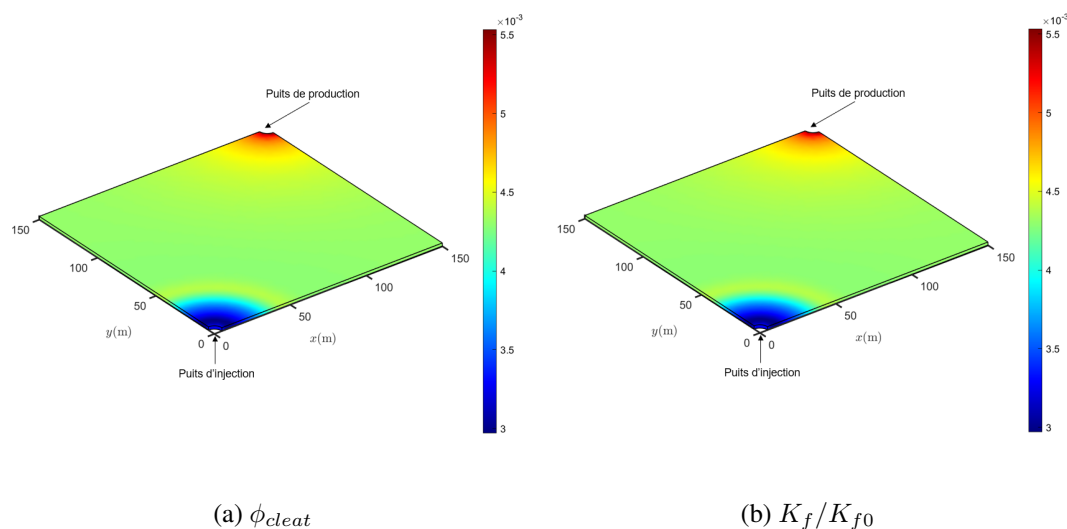


FIGURE 3 – Profils de porosité des cleats et évolution de la perméabilité du réservoir rapportée à sa valeur initiale après deux ans d'injection de CO₂

La figure (3a) montre le profil de porosité ϕ_{cleat} après deux ans d'injection de CO₂. La porosité des cleats est réduite au voisinage du puits d'injection puis cette réduction se propage vers l'intérieur du réservoir. Un phénomène contraire est observé autour du puits de production quand ϕ_{cleat} augmente à cause de la diminution de la pression totale des gaz correspondant à la contraction de la matrice. La

figure (3b) montre le rapport entre la perméabilité au bout de deux années et la valeur initiale. Une chute abrupte de perméabilité apparaît dans la zone d'injection en raison du gonflement de la matrice induite par l'adsorption de CO₂. Cependant, cette chute sera contrariée à partir d'une certaine valeur de la pression du fait de l'augmentation de la rigidité des cleats $\{K_n, K_\tau\}$.

Références

- [1] Q. D. Ha, T. D. Le, I. Panfilov, and C. Moyne, *Solvation force and adsorption isotherm of a fluid mixture in nanopores of complex geometry based on fundamental measure theory*, Journal of Physics : Condensed Matter, 33(33) : 335002, 2021.
- [2] T. D. Le, Q. D. Ha, I. Panfilov, C. Moyne, *Multiscale model for flow and transport in CO₂-enhanced coalbed methane recovery incorporating gas mixture adsorption effects*, Advances in Water Resources, 144 : 103706, 2020.
- [3] S. C. Bandis, A. C. Lumsden, N. R. Barton, *Fundamentals of rock joint deformation*, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts 20 249–268, 1983
- [4] Roth. R, *Fundamental measure theory for hard-sphere mixtures : a review*, Journal of Physics : Condensed Matter, 22(6) :063102, 2010.