



This paper is a part of the hereunder thematic dossier published in OGST Journal, Vol. 67, No. 5, pp. 731-875 and available online [here](#)

Cet article fait partie du dossier thématique ci-dessous publié dans la revue OGST, Vol. 67, n° 5, pp. 731-875 et téléchargeable [ici](#)

Dossier edited by/Sous la direction de : **E. Rosenberg**

IFP Energies nouvelles International Conference/Rencontres Scientifiques d'IFP Energies nouvelles

Pore2Field - Flows and Mechanics in Natural Porous Media from Pore to Field Scale

Pore2Field - Physique des écoulements en milieux poreux naturels : de l'échelle du pore à l'échelle du réservoir

Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP Energies nouvelles, Vol. 67 (2012), No. 5, pp. 731-875

Copyright © 2012, IFP Energies nouvelles

- 731 > Editorial
- 737 > *Molecular Dynamics Simulation of Spontaneous Imbibition in Nanopores and Recovery of Asphaltenic Crude Oils Using Surfactants for EOR Applications*
Simulations de dynamique moléculaire d'imbibition spontanée dans des nanopores et pour la récupération d'huiles brutes asphalténiques en utilisant des agents tensioactifs pour des applications d'EOR
M.R. Stukan, P. Lignoul and E.S. Boek
- 743 > *Pore-Scale Flow Simulations: Model Predictions Compared with Experiments on Bi-Dispersed Granular Assemblies*
Simulation d'écoulements à l'échelle porale : comparaison des prédictions du modèle et d'expériences sur mélanges de billes de verre bi-disperses
A.-T. Tong, E. Catalano and B. Chareyre
- 753 > *Characterization of Pore Geometry of Indiana Limestone in Relation to Mechanical Compaction*
Caractérisation de la géométrie des pores dans le calcaire de l'Indiana en relation avec la compaction mécanique
Y. Ji, P. Baud, V. Vajdova and T.-f. Wong
- 777 > *A Poromechanical Model for Coal Seams Injected with Carbon Dioxide: From an Isotherm of Adsorption to a Swelling of the Reservoir*
Un modèle poromécanique pour l'injection de dioxyde de carbone dans des veines de charbon : d'une isotherme d'adsorption à un gonflement du réservoir
S. Nikoosokhan, M. Vandamme and P. Dangla
- 787 > *Steady-State Two-Phase Flow in Porous Media: Review of Progress in the Development of the DeProF Theory Bridging Pore to Statistical Thermodynamics Scales*
Écoulement diphasique stationnaire en milieu poreux : revue des avancées sur les développements de la théorie DeProF reliant l'échelle du pore à l'échelle de la thermodynamique statistique
M.S. Valavanides
- 805 > *Transmissibility Corrections and Grid Control for Shale Gas Numerical Production Forecasts*
Corrections de transmissivités et contrôle des maillages pour les simulations numériques de production en faible perméabilité
V. Artus and D. Fructus
- 823 > *Integrating Data of Different Types and Different Supports into Reservoir Models*
Construction de modèles de réservoir contraints par des données de natures différentes et caractéristiques d'échelles différentes
M. Le Ravalec, S. Da Veiga, R. Derfoul, G. Enchéry, V. Gervais and F. Roggero
- 841 > *Evaluation of EnKF and Variants on the PUNQ-S3 Case*
Évaluation de l'EnKF et des variantes du cas PUNQ-S3
R. Valestrand, G. Nævdal and A.S. Stordal
- 857 > *Application of Hierarchical Matrices to Linear Inverse Problems in Geostatistics*
Application des matrices hiérarchiques aux problèmes d'inversion linéaire en géostatistique
A.K. Saibaba, S. Ambikasaran, J. Yue Li, P.K. Kitanidis and E.F. Darve

Éditorial

PHYSIQUE DES ÉCOULEMENTS EN MILIEUX POREUX NATURELS : DE L'ÉCHELLE DU PORE À L'ÉCHELLE DU RÉSERVOIR

La conférence intitulée *Pore2Field – Flows and Mechanics in Natural Porous Media from Pore to Field Scale*, qui s'est tenue du 16 au 18 novembre 2011 à IFP Energies nouvelles (Rueil-Malmaison, France) et a rassemblé près de 160 participants, a traité de nombreux aspects de la modélisation des milieux poreux naturels, de la description géométrique 3D de l'espace des pores à la modélisation des écoulements multiphasiques et des phénomènes couplés, tant à l'échelle du pore lui-même qu'à celle du réservoir, en intégrant des applications opérationnelles comme l'homogénéisation des données ou le monitoring de gisement.

Ce numéro spécial d'*Oil & Gas Science and Technology – Revue d'IFP Energies nouvelles* présente neuf articles issus de cette conférence dont la variété des approches illustre bien la complexité de la problématique traitée dont les domaines d'applications immédiats vont de l'exploitation des hydrocarbures liquides et gazeux conventionnels et non conventionnels, à l'injection de CO₂ dans les veines de charbon.

Par extension, ces contributions qui relèvent également de sciences connexes comme l'hydrogéologie, la géotechnique, la pédologie et le génie chimique des milieux poreux artificiels, sont susceptibles d'apports aux domaines du *coalbed methane* et du stockage de CO₂.

Les articles sont ordonnés suivant les échelles géométriques croissantes, de l'échelle du pore à celle du réservoir. On y trouve notamment :

- une application de la dynamique moléculaire à la modélisation des processus d'imbibition dans les nanopores présentée dans le cadre de la récupération d'huiles asphalténiques en présence de tensio-actifs de M.R. Stukan *et al.* ;
- une simulation numérique du couplage hydromécanique par combinaison des méthodes des éléments discrets et des volumes finis appliquée à des assemblages granulaires bi-dispersés de A.-T. Tong *et al.* ;
- une caractérisation de la géométrie des pores d'un calcaire, en relation avec son niveau de compaction dans les réservoirs de Y. Ji *et al.* ;
- un modèle poromécanique prenant explicitement en compte l'effet de l'adsorption sur le comportement mécanique d'un milieu microporeux et présenté dans le cadre de l'injection de CO₂ dans les veines de charbon de S. Nikoosokhan *et al.* ;
- une tentative de description complète de l'écoulement permanent diphasique en milieu poreux en passant de l'échelle du pore à celle de la thermodynamique statistique de M.S. Valavanides ;
- une étude de l'impact des corrections de transmissivité sur les prédictions de production dans les réservoirs de gaz de schiste de V. Artus et D. Fructus ;
- des méthodes avancées pour contraindre les modèles de réservoirs par des données de natures différentes et à des échelles différentes de M. Le Ravalec *et al.* ;
- une évaluation de la méthode des filtres de Kalman pour le calage en temps réel de la production dans les modèles de réservoir de R. Valestrand *et al.* ;
- enfin, une présentation des méthodes d'inversion géostatistiques et des défis posés par leur application à grande échelle par A.K. Saibaba *et al.*

L'exploration-production des hydrocarbures constitue une très longue chaîne de processus faisant intervenir de nombreux domaines scientifiques et techniques dont la taille des mailles de scrutation va en diminuant fortement avec sa mise en œuvre – de la dizaine de kilomètres pour le profil sismique à la dizaine de mètres pour la cible du forage, puis de la dizaine de centimètres pour les diagraphies au micron pour le milieu poreux lui-même – et tous les maillons de cette chaîne doivent assurer le même niveau d'exigence.

C'est pourquoi, sous la pression de contraintes de production toujours plus complexes et variées, tant pour la récupération assistée des hydrocarbures conventionnels que pour l'extraction des hydrocarbures liquides et gazeux non conventionnels, l'étude des écoulements polyphasiques en milieu poreux doit sans cesse s'améliorer par la connaissance et la maîtrise d'un nombre toujours croissant de grandeurs physiques et de paramètres descriptifs. On peut ainsi citer, ne serait-ce que pour les pressions capillaires et perméabilités relatives de chacune des phases fluides : l'architecture des pores, la façon dont les grandeurs physiques se répartissent dans le continuum des pores, l'influence des propriétés physiques des fluides comme la viscosité, la tension interfaciale, la mouillabilité ou les isothermes d'adsorption, tout comme enfin l'impact des caractéristiques physico-chimiques de la nano et de la microstructure du milieu poreux, qu'il soit fissuré ou non. Parler d'espace poreux renvoie à la définition du mot « pores » et à leur classification usuelle en fonction de leur dimension et c'est pourquoi il semble pertinent de fixer avant toute autre considération quelques ordres de grandeur. Il paraît raisonnable d'attribuer aux « micropores (ou nanopores) » l'ordre de grandeur qui correspond à la portée de forces de surface comme celles de van der Waals, c'est-à-dire au plus une dizaine d'angströms, car en deçà il conviendrait plutôt de parler de site d'adsorption moléculaire. À cette échelle, il n'y a pas réellement de phase fluide et les notions d'écoulement, de viscosité, voire même de pression, deviennent délicates à définir, alors même que les forces de surface exercées par la paroi du pore jouent un rôle essentiel dans le comportement du « fluide » qui y est contenu. Au-delà, on entre dans le domaine des « mésopores » où s'appliquent les lois de la mécanique des fluides, ainsi que celles relatives aux forces capillaires liées à la tension interfaciale entre fluides contenus, et entre ces fluides et le contenant poreux. Cette situation prévaut également pour les « macropores », c'est-à-dire au-delà de 0,1 μm . Outre les approches physiques classiques, ces trois domaines se prêtent admirablement bien maintenant aux méthodes de la modélisation moléculaire laquelle, située à la jonction entre la mécanique quantique et la mécanique des milieux continus, apporte une compréhension nouvelle et une meilleure quantification des phénomènes physiques qui y sont mis en jeu. Cette technique reproduit virtuellement, à l'aide de codes de calculs et d'outils informatiques, les interactions entre les atomes d'un fluide ou d'un matériau, afin d'en comprendre le comportement et d'en déterminer les propriétés électroniques, physiques et donc mécaniques, thermodynamiques, voire catalytiques. Ces simulations peuvent impliquer de quelques dizaines à plusieurs dizaines de milliers d'atomes.

Étendre, par étape, cette conceptualisation à l'ensemble du réservoir nécessite d'une part de maîtriser l'hétérogénéité constitutive du milieu poreux par la définition d'un milieu homogène équivalent doté de lois d'équilibre et de transfert robustes, d'autre part de procéder à une « macroscopisation » du système. Celle-ci peut être acquise, soit par des prises de moyenne volumique ou *averaging method*, soit par des méthodes fondées sur la thermodynamique des processus irréversibles qui, par des bilans de quantité de mouvement, d'énergie et d'entropie, expriment formellement la production d'entropie engendrée par les processus de transfert de toutes natures au sein du milieu poreux. Mentionnons les méthodes en plein essor d'homogénéisation déterministe ou stochastique, issues de la physique et des mathématiques les plus actuelles. Ces mêmes techniques permettent en outre de gérer l'aléa résiduel lié à la description fondamentalement incomplète des milieux naturels aux échelles des réservoirs d'hydrocarbures et en parallèle de résoudre dans les meilleures conditions les difficiles problèmes de mise à jour des modèles à l'aide des données de production.

Dans cette démarche exigeante d'exhaustivité descriptive des phénomènes, il ne faut pas oublier le contenant qui est susceptible d'interagir avec le contenu en termes de chimie, mais aussi de mécanique. Par exemple, du fait de la compressibilité intrinsèque des pores et de la matrice

rocheuse, le volume offert aux fluides par le milieu poreux peut varier en fonction de la pression de ces derniers et/ou de la contrainte terrastatique.

Tous ces sujets de recherche se sont, dans ces toutes dernières décennies, très fortement développés au fur et à mesure de la mise à disposition des acteurs, d'outils et de méthodes issus de l'évolution continue des moyens de calcul informatique et de l'utilisation éclairée des mathématiques appliquées et des statistiques. Ainsi, de fortes avancées scientifiques ont-elles été accomplies en termes de compréhension, de conception, de caractérisation et de modélisation des milieux poreux. De surcroît, le caractère central de ce thème, qui justifie pleinement le numéro spécial présenté ici rend nécessaire de renforcer encore la capacité de tous à relever des défis scientifiques essentiels à l'avenir des industries du pétrole, du gaz naturel et des nouvelles énergies.

D'ailleurs, on pourrait, pour ces démarches, prendre exemple sur les sciences de la vie, très vivaces en recherches fondamentales et appliquées, qui sont également confrontées à des phénomènes qui se développent dans des structures poreuses, d'échelles géométriques variées, structures fréquentes tant végétales qu'animales. Dans le cadre d'une approche résolument transverse, les acteurs de ces domaines pourraient utilement être conviés à participer à des échanges d'idées avec le monde universitaire pétrolier.

Gilles Kimmerlin et Michel Combarous
Membres du Comité Éditorial de l'OGST

Editorial

FLOWS AND MECHANICS IN NATURAL POROUS MEDIA FROM PORE TO FIELD SCALE

The conference entitled *Pore2Field – Flows and Mechanics in Natural Porous Media from Pore to Field Scale* which was held from November 16th to 18th 2011 at IFP Energies nouvelles (Rueil-Malmaison, France) and was attended by about 160 participants, addressed many aspects of modelling of natural porous media, from the 3D geometric description of the pore space to the modelling of multiphase flows and coupled phenomena, from pore to reservoir scale, integrating operational applications such as homogenization of data or monitoring of the reservoir.

This special issue of *Oil & Gas Science and Technology – Revue IFP Energies nouvelles* presents nine papers from this conference with a variety of approaches illustrating the complexity of the issues dealt with application areas ranging from operating conventional and unconventional hydrocarbons, to CO₂ injection in coal seams.

By extension, these contributions which are also related to sciences such as hydrogeology, geotechnics, soil science and the chemical engineering of artificial porous media, are subject to contributions to the fields of coalbed methane and CO₂ storage.

These papers are ordered according to increasing geometric scales, from pore to reservoir scale. They include:

- an application of molecular dynamics modeling of imbibition process in nanopores in the context of asphaltenic oil recovery in the presence of surfactants by M.R. Stukan *et al.*;
- a numerical simulation of hydromechanical coupling by combining the discrete element method and finite volume methods applied to bi-disperse granular assemblies by A.-T. Tong *et al.*;
- a characterization of the pore geometry of a limestone, in relation to its level of compaction in reservoirs by Y. Ji *et al.*;
- a poromechanical model taking explicitly into account the effect of adsorption on the mechanical behavior of a microporous medium and presented as part of the CO₂ injection into coal seams by S. Nikoosokhan *et al.*;
- an attempt at full description of the steady-state multiphase flow in porous from the pore scale to that of statistical thermodynamics by M.S. Valavanides;
- a study of the impact of transmissivity corrections on the numerical production forecasts of shale gas reservoirs by V. Artus and D. Fructus;
- advanced methods to incorporate data of different types at the right scale into reservoir models by M. Le Ravalec *et al.*;
- an assessment of the method of the Kalman filters for improving the reservoir history matching problem by R. Valestrand *et al.*;
- finally, a presentation of geostatistical inversion methods and challenges of their large scale application by A.K. Saibaba *et al.*

The exploration and production of hydrocarbons is a very long chain of processes involving many fields of application and dealing with mesh sizes decreasing sharply – from tens of kilometers in a seismic profiles to ten meters in drilling logs and to tens of centimeters to less of one micron for the porous medium itself – and all the links in this chain must ensure the same standards.

Therefore, guided by increasingly complex and varied production constraints, both for conventional enhanced oil recovery and for the extraction of liquid and gaseous unconventional hydrocarbons, the study of multiphase flow in porous media must continually improve by the knowledge and

mastery of a growing number of physical and descriptive parameters. We can mention for instance the capillary pressures and relative permeabilities influenced by: pore architecture, how the physical parameters are distributed across the continuum of pores, the influence of the physical properties of fluids such as viscosity, interfacial tension, wettability and the adsorption isotherms, or the impact of physicochemical characteristics of the nano and microstructure of the porous medium, whether cracked or not.

Speaking of pore space refers to the definition of “pores” and their classification according to their usual size and therefore, it seems appropriate to set before any other consideration a few orders of magnitude. It seems reasonable to attribute to “micropores (or nanopores)” the order of magnitude which corresponds to the range of surface forces such as van der Waals, that is to say more than ten Angström because below one should rather speak of molecular adsorption site. At this scale, there is no real fluid phase and the concepts of flow viscosity, and even pressure become difficult to define, even though the surface forces exerted by the wall of the pore plays an essential role in the behaviour of “fluid” contained therein. At higher scale, we enter the field of “mesopores” in which the laws of fluid mechanics and those related to the capillary forces associated with the interfacial tension between fluids and between these fluids and the porous medium can be applied. This situation also prevails for “macropores”, that is to say beyond 0.1 μm .

In addition to traditional physical approaches, these scales can now be dealt with molecular modeling which, at the junction between quantum mechanics and continuum mechanics, brings a new understanding and better measurement of physical phenomena. This technique reproduces virtually, using computer codes and computer tools, the interactions between atoms of fluids or a solids, in order to understand the behaviour and to determine the electronic, physical, mechanical, thermodynamic or catalytic properties. These simulations may involve tens to tens of thousands of atoms.

Extending step by step this conceptualisation to the entire reservoir requires both to control the constitutive heterogeneity of the porous medium by the definition of an equivalent homogeneous medium with reliable equilibrium and transfer laws and to carry out an homogenisation of the system. This can be acquired by averaging methods or by methods based on the thermodynamics of irreversible processes which, based on balances of momentum, energy and entropy, formally express the entropy production generated by transfer processes of any nature in the porous medium. This includes the booming methods for deterministic or stochastic homogenisation, based on the most recent physics and mathematics. These last techniques can also manage the residual hazard linked to the fundamentally incomplete description of natural media at the scales of reservoirs, and solve difficult problems like updating models with production data.

In this demanding approach, we must not forget that the container is likely to interact with the content in terms of chemistry but also mechanical. For example, due to the intrinsic pore compressibility and the rock matrix, the volume available for fluid in the porous medium may vary depending on the pressure and on the stress.

All these subjects have been, in the last few decades, very strongly developed due to the availability of continuously evolving tools, methods and computing resources and to informed use of applied mathematics and statistics. Thus, strong scientific advances have they been fulfilled in terms of understanding, design, characterisation and modeling of porous media. Moreover, the centrality of this theme, which fully justifies the special issue presented here makes it necessary to further strengthen the ability to develop new energies.

We could, for these steps, take example on life sciences, very active in basic and applied research which are also confronted to phenomena that develop in porous structures with varied geometrical scales that are frequently met in plants and animals. Within the framework of a determinedly cross-functional approach, the actors of these domains could usefully be invited to participate in exchanges of ideas with the academia petroleum community.

Gilles Kimmerlin and Michel Combarnous
Members of Editorial Committee of OGST