

OBJET : apparition/disparition de phase

DATE : 11 septembre 2008

Le problème de l'apparition/disparition de phase dans un écoulement diphasique eau/hydrogène en milieu poreux : Proposition d'un cas test

Farid Smaï

11 septembre 2008

Il s'agit de modéliser et de simuler l'apparition et l'évolution d'un écoulement diphasique eau/hydrogène dans un milieu poreux initialement saturé en eau pure.

Il apparait en effet (voir par exemple l'exercice Couplex-Gaz) certaines difficultés pour prendre en compte dans une même simulation un écoulement présentant des régions insaturées (mélange liquide/gaz) et totalement saturées (liquide seul). On propose donc ici un cas test très simple afin d'isoler ce phénomène d'apparition/disparition de la région insaturée. Pour cela on considère une situation "quasi"-1D où les effets de la gravité sont négligés. Le cas test est présenté dans une configuration 2D mais il peut être traité de manière équivalente comme un problème 1D.

1 Modèle physique

Les hypothèses constitutives du modèles sont les suivantes :

- 2 phases : liquide et gaz

On notera avec les indices l et g les quantités relatives respectivement à la phase liquide et gazeuse. On définit respectivement p_α , S_α et ρ_α la pression, la saturation et la densité massique de la phase $\alpha \in \{g, l\}$. Les saturations vérifient : $S_l + S_g = 1$.

- 2 composants : eau et hydrogène

On notera avec les exposants w et h les quantités relatives respectivement au composant eau et hydrogène. On définit ρ_α^i la densité massique du composant $i \in \{w, h\}$ dans la phase $\alpha \in \{g, l\}$. On a $\rho_\alpha = \rho_\alpha^w + \rho_\alpha^h$ pour $\alpha \in \{g, l\}$.

- Loi de Darcy généralisé pour l'écoulement des phases

La vitesse d'écoulement de la phase $\alpha \in \{g, l\}$, \mathbf{q}_α , est donnée par

$$\mathbf{q}_\alpha = -\mathbb{K} \frac{kr_\alpha(S_\alpha)}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g})$$

où \mathbb{K} est le tenseur de perméabilité absolue ; kr_α est la perméabilité relative de la phase α ; μ_α est la viscosité de la phase α ; \mathbf{g} est l'accélération gravitationnelle.

- Diffusion au sein d'une phase

Le flux massique de diffusion du composant i dans la phase α est donné par

$$\mathbf{j}_\alpha^i = -\Phi M^i c_\alpha D_\alpha^i \nabla X_\alpha^i ; i \in \{w, h\}, \alpha \in \{g, l\}$$

où M^i est la masse molaire du composant i ; D_α^i est le coefficient de diffusion moléculaire du composant i dans la phase α ; $c_\alpha = S_\alpha (\rho_\alpha^h / M^h + \rho_\alpha^w / M^w)$ est la concentration molaire de la phase α ; $X_\alpha^i = \frac{S_\alpha \rho_\alpha^i / M^i}{c_\alpha}$ est la fraction molaire du composant i dans la phase α .

- Conservation de la masse pour chaque composant

Le principe de conservation de la masse appliqué à chaque composant s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Phi S_l \rho_l^i + \Phi S_g \rho_g^i) + \text{div} (\rho_l^i \mathbf{q}_l + \rho_g^i \mathbf{q}_g + \mathbf{j}_l^i + \mathbf{j}_g^i) = \mathcal{F}^i ; i \in \{w, h\}$$

où Φ est la porosité de la roche et \mathcal{F}^i la source volumique du composant i .

- Loi de pression capillaire

Les pressions des phases liquide et gazeuse suivent la relation :

$$p_c(S_l) = p_g - p_l .$$

- Loi des gaz parfaits et loi de Dalton pour le mélange de gaz

On suppose que le mélange gazeux se comporte comme un mélange de gaz parfait, ce qui permet d'écrire :

$$p_g = p_g^w + p_g^h \quad ; \quad p_g^i = \frac{\rho_g^i}{M^i} RT , i \in \{w, h\}$$

avec p_g^w et p_g^h les pressions partielles de la vapeur d'eau et de l'hydrogène ; R la constante universelle des gaz parfaits et T la température du gaz.

- Equilibre thermodynamique

On considère la loi de Raoult pour la vapeur d'eau

$$p_g^w = \hat{p}_g^w(T) X_l^w$$

où $\hat{p}_g^w(T)$ est la pression de vapeur saturante de l'eau pure à température T . Et on considère la loi de Henry pour l'hydrogène dissout

$$\rho_l^h = H(T) M^h p_g^h$$

où $H(T)$ est la constante de la loi de Henry.

- Ecoulement isotherme

On considère $T = Constante$ dans tout le domaine.

- Hypothèses simplificatrices

On considère les hypothèses simplificatrices suivantes :

- Eau liquide incompressible : $\rho_l^h = \rho_l^{std} = Constante$.
- Vapeur d'eau négligeable : $\rho_g^w = 0$. Ceci est équivalent à considérer $\hat{p}_g^w(T) = 0$ dans la loi de Raoult.

2 Géométrie

On considère un domaine rectangulaire de dimension L_x et L_y où l'on distingue 3 types de frontières : Γ_{in} , frontière d'entrée ; Γ_{out} , frontière de sortie ; Γ_{imp} , frontière imperméable (voir figure 1).

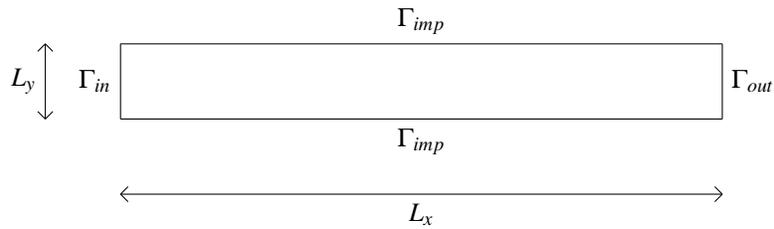


FIGURE 1 – domaine et frontières

3 Conditions limites et termes sources

Les termes sources volumiques \mathcal{F}^w et \mathcal{F}^h sont fixés à zéros sur tout le domaine :

$$\mathcal{F}^w = \mathcal{F}^h = 0 .$$

On note \mathbf{v} la normale sortante du domaine. Les conditions limites sont définies par :

- des conditions de flux nuls sur la frontière imperméable Γ_{imp} ,

$$\phi^w \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \mathbf{v} = 0 ;$$

- une injection d'hydrogène pur sur la frontière d'entrée Γ_{in} ,

$$\phi^w \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{et} \quad \phi^h \cdot \mathbf{v} = \begin{cases} Q^h & \text{si } 0 \leq t \leq T_{inj} ; \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} ;$$

- des conditions de Dirichlet (eau liquide pure de pression, p_l , fixée) sur la frontière de sortie Γ_{out} ,

$$p_l = p_{l,out} \quad \text{et} \quad (S_l \rho_l^h + S_g \rho_g^h) = 0 .$$

4 Données physiques

On considère un milieu poreux isotrope homogène, le tenseur de perméabilité absolue est donc de la forme $\mathbb{K} = k$ avec k scalaire. Le modèle de van Genuchten-Mualem fournit l'expression de la pression capillaire et des perméabilités relatives en fonction de la saturation liquide :

$$p_c = P_r \left(S_{le}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n}, \quad kr_l = \sqrt{S_{le}} \left(1 - \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^m \right)^2 \quad \text{et} \quad kr_g = \sqrt{1 - S_{le}} \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^{2m}$$

avec $S_{le} = \frac{S_l - S_{lr}}{1 - S_{lr} - S_{gr}}$ et $m = 1 - \frac{1}{n}$

où les paramètres P_r , n , S_{lr} et S_{gr} dépendent du milieu poreux. Les valeurs des paramètres décrivant le milieu poreux ainsi que les caractéristiques des fluides sont donnés dans le tableau 1. La température est fixée à $T = 303 K$

Milieu poreux		Caractéristiques des fluides	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
k	$5 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$	D_l^h	$3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Φ	0.15 (–)	μ_l	$1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$
P_r	$2 \cdot 10^6 \text{ Pa}$	μ_g	$9 \cdot 10^{-6} \text{ Pa.s}$
n	1.49 (–)	$H(T = 303K)$	$7.65 \cdot 10^{-6} \text{ mol/Pa/m}^3$
S_{lr}	0.4 (–)	M_l	10^{-2} kg/mol
S_{gr}	0 (–)	M_g	$2 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$
		ρ_l^{std}	10^3 kg/m^3
		ρ_g^{std}	$8 \cdot 10^{-2} \text{ kg/m}^3$

TABLE 1 – Valeurs des paramètres du milieu poreux et caractéristiques des fluides

Les paramètres du cas test ainsi que le temps de simulation, T_{simul} , sont donnés dans le tableau 2.

Paramètre	Valeur
L_x	200 m
L_y	20 m
Q^h	$1.5 \cdot 10^{-5} \text{ m/ans}$
$p_{l,out}$	10^6 Pa
T_{inj}	$5 \cdot 10^5 \text{ ans}$
T_{simul}	10^6 ans

TABLE 2 – Valeurs des paramètres du cas test

5 Indicateurs

On propose de présenter les indicateurs suivants :

- Position du front de saturation au cours du temps ;
- Flux sortant en Γ_{out} des composants eau et hydrogène ;
- Maximum des pressions liquide et gazeuse au cours du temps ;
- Maximum de la saturation de gaz au cours du temps.