

### Écoulement diphasique eau/hydrogène dans un milieu poreux hétérogène : Cas test

Farid Smaï

28 juillet 2009

Il s'agit de simuler un écoulement diphasique eau/hydrogène dans un milieu poreux hétérogène (deux roches avec des caractéristiques intrinsèques et multiphasiques différentes). L'écoulement, mono-dimensionnel, est généré par une injection d'hydrogène à une extrémité du domaine. Les effets de la gravité sont négligés. Une déclinaison de l'exercice avec de l'eau pure en conditions initiales est proposée en section 6.

Les résultats du cas tests sont disponibles sur [http://sources.univ-lyon1.fr/cas\\_test.html](http://sources.univ-lyon1.fr/cas_test.html)

## 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  $p_\alpha$ ,  $S_\alpha$  et  $\rho_\alpha$  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  $\rho_\alpha^i$  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  $\alpha \in \{g, l\}$ ,  $\mathbf{q}_\alpha$ , 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 ;  $kr_\alpha$  est la perméabilité relative de la phase  $\alpha$  ;  $\mu_\alpha$  est la viscosité de la phase  $\alpha$  ;  $\mathbf{g}$  est l'accélération gravitationnelle.

### - Diffusion au sein d'une phase

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

### - 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  $\Phi$  est la porosité de la roche et  $\mathcal{F}^i$  la source volumique du composant  $i$ . On définit  $\phi^w$  et  $\phi^h$ , les flux massiques respectivement du composant eau et du composant hydrogène, par

$$\phi^i = \rho_l^i \mathbf{q}_l + \rho_g^i \mathbf{q}_g + \mathbf{j}_l^i + \mathbf{j}_g^i ; i \in \{w, h\} .$$

On définit de plus  $X^w$  et  $X^h$ , les densités massiques moyenne dans le mélange respectivement du composant eau et du composant hydrogène, par

$$X^i = S_l \rho_l^i + S_g \rho_g^i ; i \in \{w, h\} .$$

### - 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 :  $\rho_l^w = \rho_l^{std} = Constante$ .
- 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 :  $\Gamma_{in}$ , frontière d'entrée ;  $\Gamma_{out}$ , frontière de sortie ;  $\Gamma_{imp}$ , frontière imperméable (voir figure 1). Le domaine est scindé en deux sous-domaines  $\Omega_b$  et  $\Omega_c$ , respectivement de longueur  $L_b$  et  $(L_x - L_b)$  (voir figure 1).

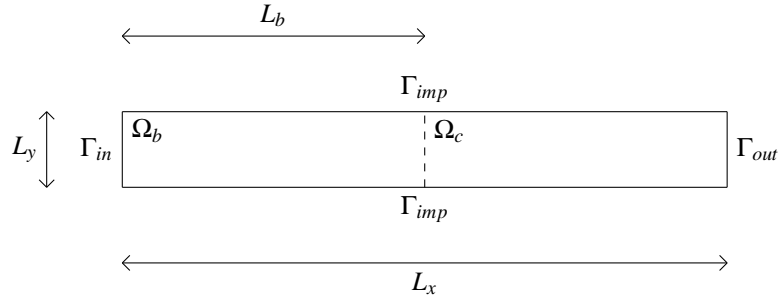


FIGURE 1 – domaine et frontières

## 3 Conditions limites et conditions initiales

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  $\Gamma_{imp}$ ,

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

- une injection d'hydrogène pur sur la frontière d'entrée  $\Gamma_{in}$ ,

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

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

$$p_l = p_{l,out} \quad \text{et} \quad p_g = p_{g,out} .$$

Les conditions initiales considérées correspondent à l'état stationnaire du système sans injection d'hydrogène, il s'agit donc de conditions uniformes vérifiant sur tout le domaine

$$p_l = p_{l,out} \quad \text{et} \quad p_g = p_{g,out} .$$

## 4 Données physiques

On considère un milieu poreux isotrope, le tenseur de perméabilité absolue est donc de la forme  $\mathbb{K} = k$  avec  $k$  scalaire. Le milieu est homogène dans chacun des sous-domaines  $\Omega_b$  et  $\Omega_c$ . 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  $T = 303 \text{ K}$

Milieu poreux				Caractéristiques des fluides		
Paramètre	Valeur selon le domaine			Paramètre	Valeur	
	$\Omega_b$	$\Omega_c$				
$k$	$10^{-18} \text{ m}^2$	$5 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$		$D_l^h$	$3 \cdot 10^{-9}$	$\text{m}^2/\text{s}$
$\Phi$	0.3 (-)	0.15 (-)		$\mu_l$	$1 \cdot 10^{-3}$	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$P_r$	$2 \cdot 10^6 \text{ Pa}$	$15 \cdot 10^6 \text{ Pa}$		$\mu_g$	$9 \cdot 10^{-6}$	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$n$	1.54 (-)	1.49 (-)		$H(T = 303\text{K})$	$7.65 \cdot 10^{-6}$	$\text{mol}/\text{Pa}/\text{m}^3$
$S_{lr}$	0.01 (-)	0.4 (-)		$M_l$	$10^{-2}$	$\text{kg}/\text{mol}$
$S_{gr}$	0 (-)	0 (-)		$M_g$	$2 \cdot 10^{-3}$	$\text{kg}/\text{mol}$
				$\rho_l^{std}$	$10^3$	$\text{kg}/\text{m}^3$
				$\rho_g^{std}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$\text{kg}/\text{m}^3$

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

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

## 5 Indicateurs

On propose de présenter les indicateurs suivants :

Paramètre	Valeur	
$L_x$	200	<i>m</i>
$L_y$	20	<i>m</i>
$L_b$	20	<i>m</i>
$Q^h$	$5.57 \cdot 10^{-6}$	<i>kg/m<sup>2</sup>/ans</i>
$p_{l,out}$	$10^6$	<i>Pa</i>
$p_{g,out}$	$1.5 \cdot 10^6$	<i>Pa</i>
$T_{simul}$	$10^6$	<i>ans</i>

TABLE 2 – Valeurs des paramètres du cas test

- Flux sortant en  $\Gamma_{out}$  des composants eau et hydrogène ;
- Valeurs en  $\Gamma_{in}$  des pressions liquide et gazeuse au cours du temps ;
- Valeurs en  $\Gamma_{in}$  de la saturation de gaz au cours du temps.

## 6 Déclinaison du cas test

On propose ici une déclinaison du cas test. L'idée est de partir d'une condition initiale totalement saturée en eau pure tandis que le cas présenté précédemment partait d'un état insaturé. Pour cela, il suffit de modifier la condition de Dirichlet imposée sur  $\Gamma_{out}$  et la condition initiale associée.

On considère donc pour ce nouveau cas test la même configuration que précédemment, à la différence que :

- la condition de Dirichlet sur la frontière de sortie  $\Gamma_{out}$  est fixée à

$$p_l = p_{l,out} \quad \text{et} \quad X^h = 0 ;$$

- la condition initiale est prise uniforme et fixée à

$$p_l = p_{l,out} \quad \text{et} \quad X^h = 0 .$$

On s'intéressera aux mêmes indicateurs que précédemment ainsi qu'à la position du front de saturation au cours du temps.