

CAS TEST COUPLEX-GAZ 1 : MODELISATION 2D D'UNE ALVEOLE DE DECHETS DE MOYENNE ACTIVITE A VIE LONGUE

Il s'agit de modéliser la dynamique de resaturation d'une alvéole de déchets de moyenne activité à vie longue (appelés déchets B) depuis la fermeture de l'alvéole jusqu'à la fin de la période de production de gaz.

Ce type d'ouvrage a été retenu dans le cadre de ce test car l'organisation des écoulements (en eau et en gaz) est rendue complexe par la présence dans ces alvéoles de matériaux présentant des propriétés capillaires très différentes et du fait que la production de gaz associée à ces colis démarre dès la mise en stockage (hors présence d'eau) et peut durer plusieurs dizaines de milliers d'années avec une cinétique de production variable dans le temps. Ainsi, ce sont les seules alvéoles dans le stockage qui demeurent à des saturations en gaz élevées sur une période pouvant atteindre 100 000 ans.

L'objectif de ce test est d'évaluer la capacité des codes de calcul biphasique à gérer :

- un milieu comportant des matériaux avec des propriétés capillaires très contrastées,
- des phénomènes transitoires sur des échelles de temps annuelles par rapport à des simulations plurimillénaires,

à prédire :

- la position du front de saturation
- la position du front d'hydrogène dissous,
- l'état de saturation des différents matériaux,
- Les niveaux de pressions de gaz et d'eau au cours du temps.

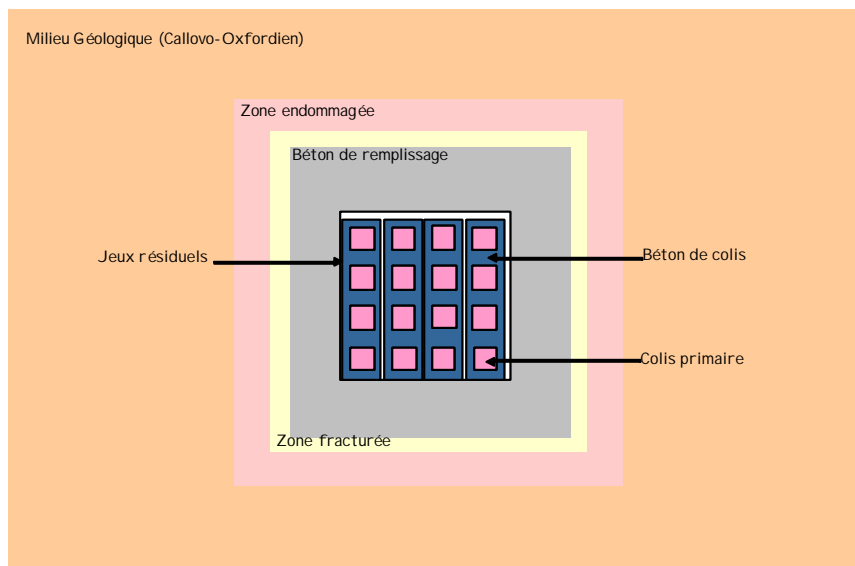


Figure 1 Vue en coupe verticale d'une alvéole de déchets B

L'alvéole de déchets B est représentée en coupe verticale perpendiculaire à l'axe longitudinal de l'alvéole (Figure 1). Le gaz est produit dans chaque colis primaire. L'épaisseur du domaine est de l'ordre de l'épaisseur de la couche géologique du Callovo-Oxfordien (environ 130m).

Le cas test 1 est divisé en deux parties qui ne diffèrent que par le niveau de description physique à traiter:

- **1a** : Introduction d'une physique simplifiée (écoulement biphasique sans prise en compte explicite de l'hydrogène et des échanges liquide/gaz), résolution du modèle mathématique constitué des équations de (1) à (9) et loi (21).
- **1b** : Prise en compte du modèle physique complet (transfert de l'hydrogène sous forme gazeuse et dissoute dans l'eau, 2 composants dans la phase gaz: vapeur d'eau et hydrogène), résolution du modèle mathématique constitué des équations de (1) à (23).

1 DESCRIPTION DETAILLEE DU CAS TEST 1

1.1 GEOMETRIE

Les dimensions de l'ensemble des objets et des zones présentes dans le domaine de calcul sont fournies dans ce paragraphe.

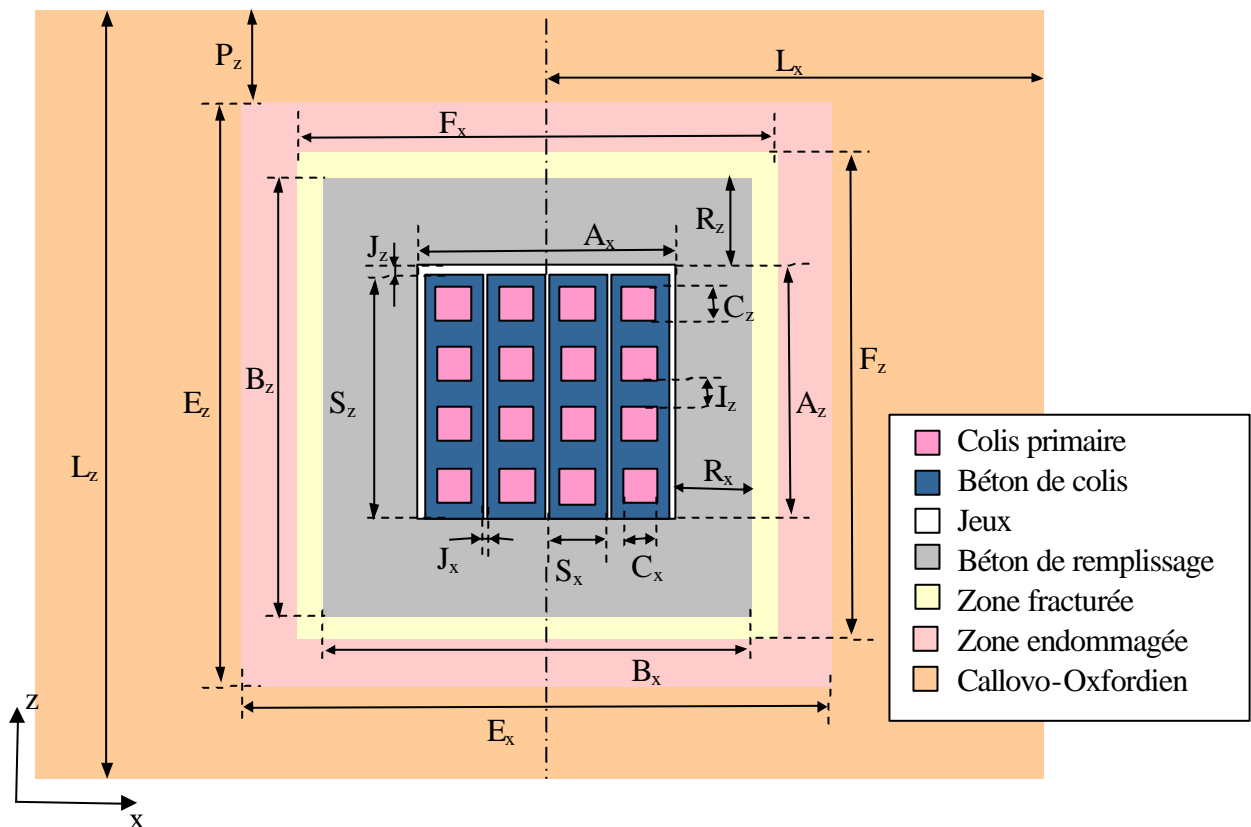


Figure 2

Définition des dimensions de différentes zones

Tableau 1 Dimension des objets dans le domaine de calcul

Paramètres	Longueur en [m]	Paramètres	Longueur en [m]
L_x	100	C_z	1.9
L_z	130	J_x	0.1
E_x	20	J_z	0.2
E_z	20	A_x	8.5
B_x	12.	A_z	8.6
B_z	12.	F_x	13
S_x	2	F_z	13
S_z	8.4	I_z	0.2
C_x	1.8	P_z	55
R_z	1.7	R_x	1.75

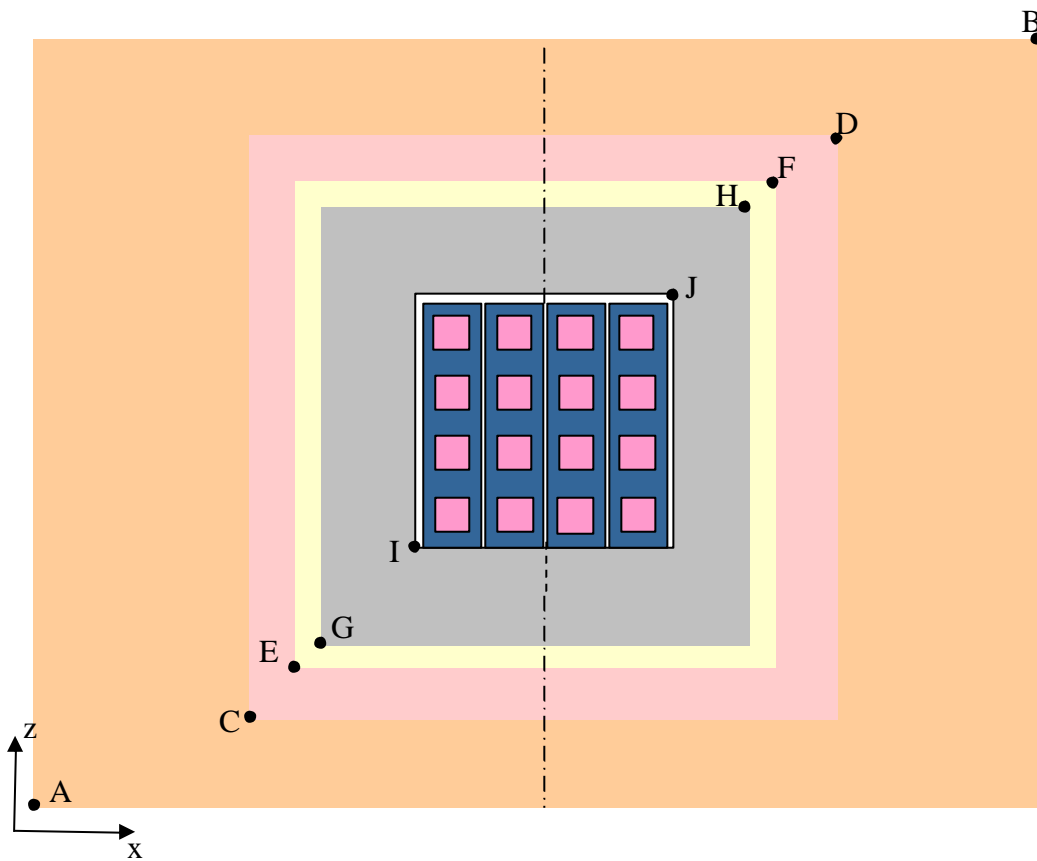


Figure 3 Définition des zones par les points sommets

Coordonnées des points de la Figure 3 (en mètre) :

A(0,0), B(200,130), C(90,55), D(110,75), E(93.5,58.5), F(106.5,71.5), G(94,59), H(106,71), I(95.75,60.7), J(104.25,69.3)

1.2 CONDITIONS AUX LIMITES

- Conditions sur le haut et le bas du domaine de calcul :

$$P_w(x, z = 0, t) = 5.510^6 Pa \quad S_w(x, z = 0, t) = 1 \quad x \in [0, 200] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$P_w(x, z = 130, t) = 4.210^6 Pa \quad S_w(x, z = 130, t) = 1 \quad x \in [0, 200] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

- Conditions sur les bords latéraux du domaine de calcul

$$Flux_w(x = 0, z, t) = 0 \quad Flux_g(x = 0, z, t) = 0 \quad z \in [0, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$Flux_w(x = 200, z, t) = 0 \quad Flux_g(x = 200, z, t) = 0 \quad z \in [0, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

1.3 PARAMETRES PHYSIQUES

Les paramètres physiques permettant d'alimenter les modèles présentés au paragraphe 2 sont donnés dans le tableau suivant :

Tableau 2 Caractéristiques physiques des matériaux

Paramètre (à 30°C)	Matériaux						
	Colis	Béton de colis	Jeux	Béton de remplissage	Zone fracturée	Zone endommagée	COX
$K_v [m^2]$	1.0E-15	1.0E-19	1.0E-12	1.0E-18	5.0E-16	5.0E-18	5.0E-21
$K_h [m^2]$	Kv=Kh						5.0E-20
Porosité [%]	25	15	100	30	16	15	15
coefficient Emmagasinement spécifique [m^{-1}]	4.0E-06	2.3E-06	4.4E-06	2.3E-06	2.4E-06	2.3E-06	2.3E-06
Paramètres diphasiques							
$S_{gr} [\%]$	0	0	0	0	0	0	0
$S_{wr} [\%]$	1	1	1	1	10	20	40
Paramètres de Van Genuchten							
$n [-]$	1.5	1.54	1.5	1.54	1.5	1.5	1.49
$P_r [Pa]$	$3 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^6$	$15 \cdot 10^6$
τ (Tortuosité)	1	2	1	2	2	2	2

Les calculs sont isothermes, la température est fixée à 30°C pour toute la durée de simulation. Il est proposé de représenter les jeux par un milieu poreux équivalent. Cependant, des solutions pour une modélisation explicite du jeu peuvent être proposées par les participants.

- Masse molaire du mélange gazeux :

La masse molaire du mélange gazeux pourra être prise égale à $2 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$ pour le cas 1a, quantité qui intervient dans la relation (21).

- Viscosité du mélange gazeux :

La viscosité du mélange vapeur d'eau hydrogène pourra être estimée par une approximation classique de type Wilke ou par la formule simplifiée suivante :

$$m_g = \frac{1}{\frac{X_{H_2}^g}{m_{H_2}^g} + \frac{X_{H_2O}^g}{m_{H_2O}^g}} \text{ avec } m_{H_2}^g(T = 303K) = 9 \cdot 10^{-6} \text{ Pa.s} \quad m_{H_2O}^g(T = 303K) = 10^{-5} \text{ Pa.s}$$

Pour le cas 1a, la viscosité du mélange gazeux pourra être prise égale à $9 \cdot 10^{-6} \text{ Pa.s}$

Pour le cas **1b**, les données sur le transfert de l'hydrogène et l'échange entre les phases sont :

- Coefficient diffusion de H_2 dissous dans l'eau :

$$D_{H_2/EAU} = 1.57 \cdot 10^{-14} \frac{T}{m_{EAU}(T)} \quad (\text{m}^2/\text{s})$$

- Coefficient diffusion de H_2 dans la vapeur d'eau :
($T_0=303 \text{ K}$ et à $P_0=1.01 \cdot 10^5 \text{ Pa}$: $D_0=9.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$)

$$D_{H_2-H_2O}^g = D_0 \left(\frac{P_0}{P_g} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.75} \quad (\text{m}^2/\text{s})$$

- Coefficient diffusion de H_2 dissous dans l'eau du milieu poreux :

$$D_{H_2}^w = S_w \left(\frac{w}{t} \right) D_{H_2/EAU}$$

- Coefficient diffusion de H_2 dans le mélange binaire H_2 /Vapeur d'eau du milieu poreux :

$$D_{H_2/vap}^g = (1 - S_w) \left(\frac{w}{t} \right) D_{H_2-H_2O}^g$$

- Solubilité de l'hydrogène dans l'eau : $H_{H_2}(T = 303K) = 7.6510^{-6} \text{ mol.Pa}^{-1} . \text{m}^{-3}$

Remarque : La température dans les modèles de diffusion est donnée en Kelvin.

1.4 CONDITIONS INITIALES :

Saturations en eau:

- Dans le Callovo-Oxfordien, la zone fracturée et la zone endommagée, la saturation en eau est de 100%.
- Dans le béton de remplissage, la saturation en eau est de 70%.
- Dans le béton de colis de stockage, la saturation en eau est de 60%.
- Dans le jeu, la saturation en eau est de 10%.
- Dans le colis primaire, la saturation en eau est de 20%.

Pressions :

- Dans les matériaux saturés en eau à 100%, la pression est répartie linéairement conformément au gradient de pression entre le toit et le mur du Callovo-Oxfordien (cf. Conditions aux limites)
- Dans les matériaux partiellement saturés, la pression de gaz est de 1 atmosphère. La pression en eau se déduit de la pression de gaz et de la saturation par l'intermédiaire des modèles de Van Genuchten associés à chaque matériau.

1.5 TERME DE PRODUCTION POUR L'HYDROGENE :

Les termes de production de gaz sont à appliquer pour chaque colis primaire pour les cas 1a et 1b.

Termes de production pour le Cas 1a :

- Pour $0 < t=500$ ans, $Q^g = 6.25 \text{ mol / an}$ (soit 100 moles d'H₂ par section)
 $Q^w = 0$
- Pour $500 < t=10\ 000$ ans $Q^g = 0.5 \text{ mol / an}$
 $Q^w = 0$
- Pour $t > 10\ 000$ ans $Q^g = 0$
 $Q^w = 0$

Termes de production pour le Cas 1b :

- Pour $0 < t=500$ ans, $Q_{H_2}^g = 6.25 \text{ mol / an}$ (soit 100 moles d'H₂ par section)
 $Q_{H_2}^w = 0$
- Pour $500 < t=10\ 000$ ans $Q_{H_2}^g = 0.5 \text{ mol / an}$
 $Q_{H_2}^w = 0$
- Pour $t > 10\ 000$ ans $Q_{H_2}^g = 0$
 $Q_{H_2}^w = 0$

1.6 DUREE DE SIMULATION

La simulation sera réalisée entre l'instant $t_0=0$ et l'instant t_{fin} correspondant au temps de disparition de la phase gazeuse dans le domaine de calcul.

La disparition de la phase gazeuse est supposée être atteinte lorsque la saturation en gaz est inférieure à 0,01% en tout point du domaine de calcul.

1.7 SORTIES DEMANDEES

Les sorties demandées pour les cas 1a et 1b sont :

- Le temps nécessaire à la disparition de la phase gazeuse,
- Les flux d'hydrogènes (en mol/an) à travers les limites supérieures et inférieures du domaine de calcul en fonction du temps :
 - Flux_{H₂}(t) pour $0 < x < 200\text{m}$, $z=0\text{m}$
 - Flux_{H₂}(t) pour $0 < x < 200\text{m}$, $z=130\text{m}$

- La saturation en eau, la pression de gaz et la pression d'eau en fonction du temps en 7 points :
 - (101,62), (101, 64.9), (101, 69.2), (101, 70), (101, 71.3), (101,73), (101,77)
- La position du front de saturation en gaz dans l'argilite en fonction du temps sur la droite $z=65$ (la position du front est déterminée au point où la saturation en gaz est inférieure à 0,01%).
- Un profil de pression de gaz, de pression d'eau et de saturation en gaz en $x=103$ m aux temps 0, 250, 500, 1000, 5000, 7500, 10000, 20000, 40000, t_{fin} .
- Une carte d'iso-valeurs de saturation en gaz (entre 0 et 100% par plage de 5%, plus les valeurs 3%, 1%, 0.3% et 0.1%) et de pression d'eau aux temps 0, 250, 500, 1000, 5000, 7500, 10000, 20000, 40000, t_{fin}
- Le flux d'hydrogène (en mol/an) à travers la surface délimitée par l'interface entre le béton de remplissage et la zone fracturée :

$$\text{Flux}_{H_2}(t) \text{ pour } (x=94m, 59 < z < 71m) \cup (x=106m, 59 < z < 71m) \cup (z=59m, 94 < x < 106m) \cup (z=71m, 94 < x < 106m)$$

Pour le cas 1b est demandé :

- La pression partielle d'hydrogène en fonction du temps en 7 points
 - (101,62), (101, 64.9), (101, 69.2), (101, 70), (101, 71.3), (101,73), (101,77)

2 MODELE MATHEMATIQUE PROPOSE POUR L'EXERCICE

La pression capillaire est définie comme la différence entre la pression de gaz et la pression de l'eau et s'exprime de la façon suivante :

$$P_c = P_g - P_w \quad (1)$$

- P_c est la pression capillaire (Pa),
- P_g est la pression totale du mélange gazeux (Pa),
- P_w est la pression d'eau (Pa).

La dépendance entre les saturations en eau et en gaz dans le milieu poreux s'exprime suivant la relation suivante :

$$S_g + S_w = 1 \quad \text{avec} \quad S_g = \frac{V_g}{V_p} \quad \text{et} \quad S_w = \frac{V_w}{V_p}$$

- S_g est la saturation en gaz (-),
- S_w est la saturation en eau (-),
- V_g est le volume de gaz (m^3),
- V_w est le volume d'eau (m^3),
- V_p est le volume de pore (m^3).

Le modèle de Van Genuchten est retenu pour exprimer la pression capillaire en fonction de la saturation effective du milieu.

$$S_{we} = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{gr}} \quad (2)$$

$$S_{we} = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{P_c}{P_r} \right)^n \right]^m} \quad (3)$$

- S_{we} est la saturation effective (-),
- S_{wr} est la saturation résiduelle en eau (-),
- S_{gr} est la saturation résiduelle en gaz (-),
- P_r est un paramètre de la loi de Van Genuchten (Pa),
- n, m sont des coefficients de la loi de Van Genuchten tels que : $m = 1 - \frac{1}{n}$

Le paramètre P_r a la dimension d'une pression et est en général supérieur à la pression d'entrée de gaz dans le milieu.

La perméabilité relative à l'eau s'exprime en intégrant le modèle de prédiction proposé par Mualem (1976) dans le modèle de capillarité de Van Genuchten.

$$k_r^w = \sqrt{S_{we}} \left[1 - \left(1 - S_{we}^{1/m} \right)^m \right]^2 \quad (4)$$

- k_r^w est la perméabilité relative à l'eau (-)

La perméabilité au gaz est formulée de façon similaire

$$k_r^g = \sqrt{1 - S_{we}} \left[1 - S_{we}^{1/m} \right]^{2m} \quad (5)$$

- k_r^g est la perméabilité relative au gaz (-)

Le déplacement du gaz et de l'eau au sein du milieu poreux est représenté dans ce contexte par les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement (réduite à la loi de Darcy généralisée) telles que

$$U_w = -\frac{k k_r^w (S_w)}{\mathbf{m}_w} (\nabla P_w + \mathbf{r}_w g \nabla z) \quad (6)$$

$$U_g = -\frac{k k_r^g (S_g)}{\mathbf{m}_g} (\nabla P_g + \mathbf{r}_g g \nabla z) \quad (7)$$

- k est la perméabilité intrinsèque (m^2),
- \mathbf{m}_g est la viscosité du mélange gazeux ($\text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$),
- \mathbf{m}_w est la viscosité de l'eau ($\text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$),
- \mathbf{r}_g est la masse volumique du mélange gazeux ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$),
- \mathbf{r}_w est la masse volumique de l'eau ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$),
- g est l'accélération de la pesanteur ($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$),
- z est l'altitude (m),
- U_w est la vitesse de Darcy pour l'eau ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$),
- U_g est la vitesse de Darcy pour le gaz ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$).

Equation de conservation du liquide :

$$\frac{\partial(\mathbf{r}_w \mathbf{w} S_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r}_w U_w) = Q^w \quad (8)$$

- \mathbf{w} est la porosité (-),
- Q^w est un terme de consommation/production d'eau ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

Equation de conservation du mélange gazeux :

$$\frac{\partial(\mathbf{r}_g \mathbf{w} S_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r}_g U_g) = Q^g \quad (9)$$

- Q^g est un terme de consommation/production de gaz ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$).

On introduit la fraction massique d'hydrogène gazeux :

$$X_{H_2}^g = \frac{\mathbf{r}_{H_2}^g}{\mathbf{r}_g} \quad (10)$$

$$\text{avec } \mathbf{r}_{H_2}^g = \frac{m_{H_2}^g}{V_g} \text{ et } \mathbf{r}_g = \frac{m^g}{V_g}$$

- $X_{H_2}^g$ est la fraction massique d'hydrogène gazeux (-),
- $m_{H_2}^g$ est la masse d'hydrogène dans la phase gazeuse (kg),
- m^g est la masse totale de gaz (kg),
- $\mathbf{r}_{H_2}^g$ est la masse volumique pour l'hydrogène gazeux dans le mélange (kg.m^{-3}).

Conservation de la masse pour l'hydrogène gazeux :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w} S_g \mathbf{r}_g X_{H_2}^g) + \nabla \cdot (\mathbf{r}_g X_{H_2}^g U_g - J_{H_2}^g) + \Omega_{H_2}^{g/l} = Q_{H_2}^g \quad (11)$$

- $\Omega_{H_2}^{g/l}$ est le terme d'échange de la phase gazeuse vers la phase liquide pour H_2 ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$),
- $Q_{H_2}^g$ est un terme de production/consommation d'hydrogène gazeux ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$),
- $J_{H_2}^g$ est la composante diffusive du flux de transport d'hydrogène gazeux ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$).

L'expression du flux diffusif pour un mélange binaire (H_2 /vapeur d'eau) est exprimée par une loi de Fick.

$$J_{H_2}^g = \mathbf{r}_g D_{H_2/vap}^g \nabla X_{H_2}^g \quad (12)$$

- $D_{H_2/vap}^g$ est le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans la vapeur d'eau ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$).

On introduit la fraction massique en hydrogène dissous :

$$X_{H_2}^w = \frac{\mathbf{r}_{H_2}^w}{\mathbf{r}_w} \quad (13)$$

- $X_{H_2}^w$ est la fraction massique d'hydrogène dissous (-),
- $\mathbf{r}_{H_2}^w$ est la masse volumique pour l'hydrogène dissous (kg.m^{-3}),

Conservation de la masse pour l'hydrogène dissous :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w} S_w \mathbf{r}_w X_{H_2}^w) + \nabla \cdot (\mathbf{r}_w X_{H_2}^w U_w - J_{H_2}^w) + \Omega_{H_2}^{l/g} = Q_{H_2}^w \quad (14)$$

- $\Omega_{H_2}^{l/g}$ est le terme d'échange de la phase liquide vers la phase gazeuse pour H_2 ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$),
- $Q_{H_2}^w$ est un terme de production/consommation d'hydrogène dissous ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$),
- $J_{H_2}^w$ est la composante diffusive du flux de transport d'hydrogène dissous ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$).

Les termes d'échanges entre la phase liquide et la phase gazeuse pour l'hydrogène suivent la relation suivante :

$$\Omega_{H_2}^{l/g} = -\Omega_{H_2}^{g/l} \quad (15)$$

L'expression du flux diffusif pour l'hydrogène dissous est exprimée par une loi de Fick

$$J_{H_2}^w = \mathbf{r}_w D_{H_2}^w \nabla X_{H_2}^w \quad (16)$$

- $D_{H_2}^w$ est le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans l'eau ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$).

Une partie des gaz produits vont être mis en solution dans l'eau de pore. La limite de solubilité du gaz dans l'eau dépend essentiellement des conditions thermodynamiques et est estimée par l'intermédiaire de la loi de Henry dont l'expression est :

$$C_{H_2}^w = H_{H_2}(T) P_{H_2}^g \quad (17)$$

$$\text{où } C_{H_2}^w = \frac{X_{H_2}^w \mathbf{r}_w}{M_{H_2}}$$

- $C_{H_2}^w$ est la concentration d'hydrogène dans l'eau (mol.m^{-3}),
- H_{H_2} est la constante de Henry pour l'hydrogène ($\text{mol.m}^{-3}.\text{Pa}^{-1}$),
- $P_{H_2}^g$ est la pression partielle d'hydrogène dans le mélange gazeux (Pa),
- M_{H_2} est la masse molaire de l'hydrogène (kg.mol^{-1})

La relation entre les pressions partielles de chaque gaz présents dans le mélange et la pression totale du gaz est donnée par la loi de Dalton :

$$P_g = P_{H_2}^g + P_{vap}^g \quad (18)$$

- P_{vap}^g est la pression partielle de vapeur d'eau dans le mélange gazeux (Pa).

Chaque gaz présent dans le mélange est supposé parfait :

$$P_{H_2}^g = \frac{\mathbf{r}_{H_2}^g}{M_{H_2}} RT \quad \text{et} \quad P_{vap}^g = \frac{\mathbf{r}_{vap}^g}{M_{vap}} RT \quad (19, 20)$$

Pour le mélange, on écrit :

$$P_g = \frac{\mathbf{r}_g}{M} RT \quad (21)$$

- M est la masse molaire du mélange gazeux (H_2 +vapeur d'eau) ($kg.mol^{-1}$),
- R est la constante des gaz parfait ($J.mol^{-1}.K^{-1}$), $R=8.314 J.mol^{-1}.K^{-1}$,
- T est la température (K).

La pression de vapeur saturante dépend uniquement de la température :

$$\log_{10}(P_{sat}) = 2.786 + 0.031514 T - 1.23731 \times 10^{-4} T^2 + 4.2267 \times 10^{-7} T^3 - 8.1308 \times 10^{-10} T^4 \quad (22)$$

- P_{sat} est la pression de vapeur d'eau saturante (Pa).

La loi de Kelvin donne une relation entre la pression de vapeur saturante, la pression de vapeur et la pression capillaire.

$$P_{vap}^g(T, S_w) = \exp\left(\frac{M_w P_c(S_w)}{\mathbf{r}_w RT}\right) P_{sat}(T) \quad (23)$$

Il pourra être retenu comme hypothèse de modélisation que : $P_{vap}^g(T, S_w) = P_{sat}(T)$.

Remarque concernant la possibilité de simplifier les équations de transfert d'hydrogène :

En sommant, les équations de conservation de l'hydrogène en phase gazeuse (11) et en phase aqueuse (14), et en utilisant la loi de Henry, il est possible de réduire le nombre de variables du système.

Exemple de simplification possible :

(11)+(14)

donne :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w} S_w \mathbf{r}_w X_{H_2}^w + \mathbf{w} S_g \mathbf{r}_g X_{H_2}^g) + \nabla \cdot (\mathbf{r}_w X_{H_2}^w U_w + \mathbf{r}_g X_{H_2}^g U_g - J_{H_2}^w - J_{H_2}^g) + Q_{H_2}^w + Q_{H_2}^g = 0 \quad (24)$$

En utilisant :

- la loi de Henry (17) : $\mathbf{r}_w X_{H_2}^w = H_{H_2}(T) M_{H_2} P_{H_2}^g$

- La loi de Dalton (18) : $P_g = P_{H_2}^g + P_{vap}^g$
- La loi des gaz parfait pour l'hydrogène : $X_{H_2}^g = P_{H_2}^g \frac{M_{H_2}}{r_g RT}$
- L'hypothèse : $P_{vap}^g(T, S_w) = P_{sat}(T)$
- La relation $S_g + S_w = 1$;
- $r_g = P_{H_2}^g \frac{M_{H_2}}{RT} + P_{vap}^g \frac{M_{vap}}{RT}$

L'équation 24, peut s'exprimer en utilisant comme inconnues $P_{H_2}^g$ et S_w .