

CAS TEST COUPLÉX-GAZ 2 :

MODELISATION 3D D'UNE ZONE DE STOCKAGE DE DECHETS VITRIFIES

Une des difficultés majeure dans la représentation des transferts de gaz dans un stockage de déchets radioactifs est de modéliser simultanément l'ensemble des sources de gaz (en général localisées dans les alvéoles de stockage) et les voies de transfert constituées par le réseau souterrain de galeries (Figure 1).

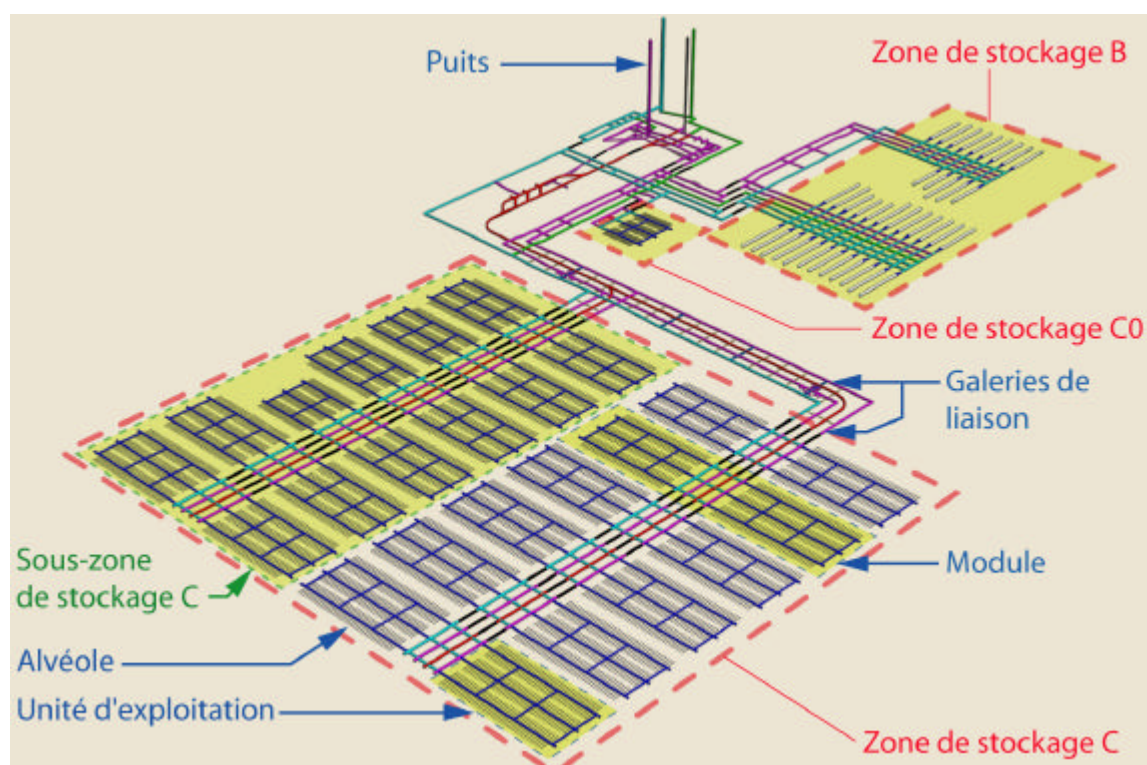


Figure 1 Représentation des zones de l'ensemble des zones de stockage dans un scénario type S1

Dans ce cas test, il s'agit de représenter une portion du stockage limitée à une zone de déchets vitrifiés (appelés déchets C) comprenant deux rangées de 30 alvéoles (Figure 2, Figure 3, Figure 4)

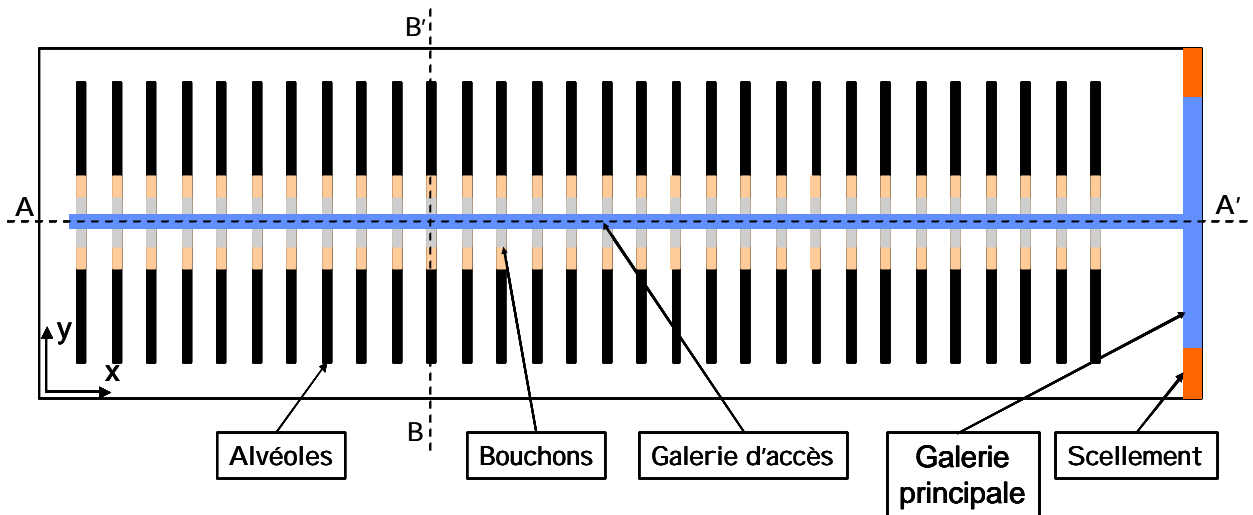


Figure 2 Représentation du domaine de calcul dans le plan horizontal (X, Y)

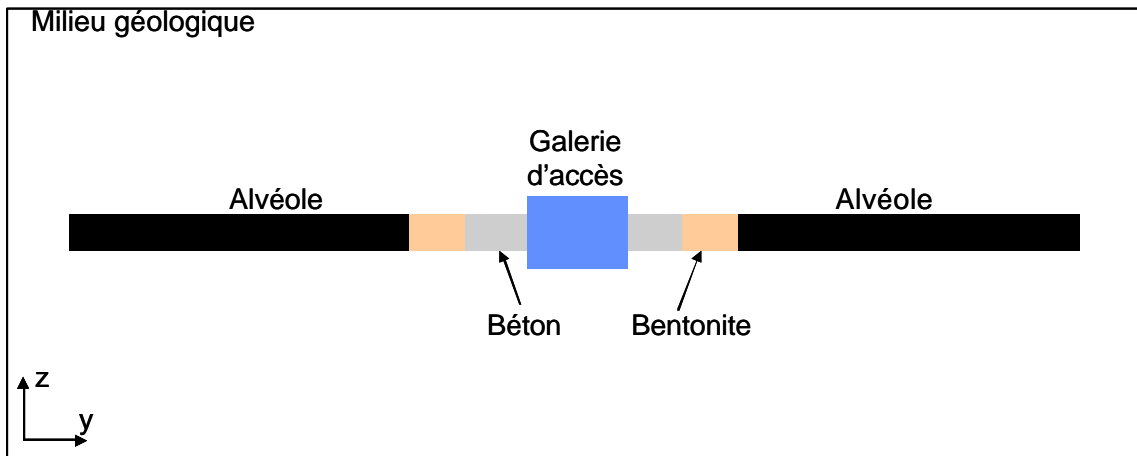


Figure 3 Représentation du domaine de calcul dans le plan vertical (Y, Z) (coupe BB')

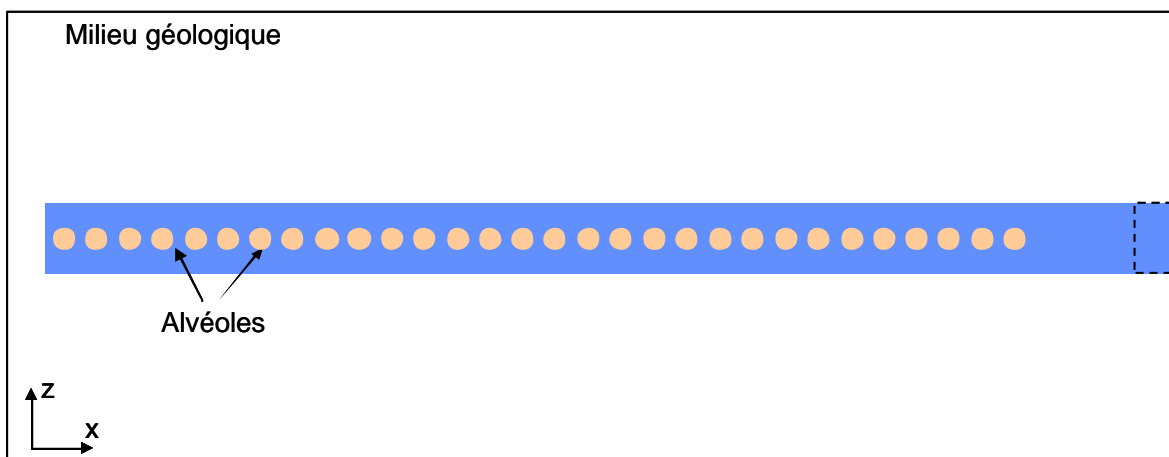


Figure 4 Représentation du domaine de calcul dans le plan vertical (X, Z) (coupe AA')

Le domaine de calcul est en 3 dimensions. L'extension verticale est limitée à l'épaisseur de la couche du Callovo-Oxfordien. Les extensions dans les deux autres directions sont représentatives de la distance inter alvéoles.

Un terme de production de gaz est donné pour chaque alvéole de stockage. Il est imposé sur la surface externe du cylindre qui représente schématiquement l'alvéole. Les matériaux à prendre en compte dans cette simulation sont les remblais de galerie, la bentonite des scellements de galerie, l'argilite du Callovo-Oxfordien. L'alvéole est constitué par un matériau imperméable à l'eau et au gaz.

L'objectif de ce cas est d'inciter les équipes participantes à proposer des solutions pour modéliser une zone comportant un grand nombre d'alvéoles et pour décrire le transfert des gaz à travers le réseau de galeries. Les principales contraintes de ce cas sont de garder des temps de calcul acceptables pour les outils de simulation tout en respectant la physique du problème.

La comparaison portera sur la méthode mise en œuvre pour réaliser la modélisation et permettant d'aboutir à des résultats satisfaisants.

Ce test est constitué de 2 sous cas :

- **2a** : Modélisation explicite de l'ensemble des objets présents dans le domaine de calcul (chaque alvéole avec son bouchon doit être maillée) (Figure 2). La modélisation se fera en utilisant le modèle physique complet.
- **2b** : Modélisation de la même configuration géométrique en proposant une méthode qui permette de démontrer un gain sur le temps de calcul par rapport au cas 2a, en conservant la précision du résultat. Des méthodes de types décomposition de domaine, homogénéisation sont attendues pour la réalisation de ce test.

La validation de la méthode utilisée pour le cas 2b se fera par comparaison avec le cas 2a.

1 DESCRIPTION DETAILLEE DU CAS TEST 2

1.1 GEOMETRIE

Les alvéoles, les bouchons de bentonite et les massifs d'appui en béton ont la même section circulaire.

Les sections de la galerie d'accès et de la galerie principale sont carrées. Les alvéoles sont positionnées à mi hauteur dans la galerie d'accès et dans le domaine de calcul. Il y a 30 alvéoles de chaque côté de la galerie d'accès.

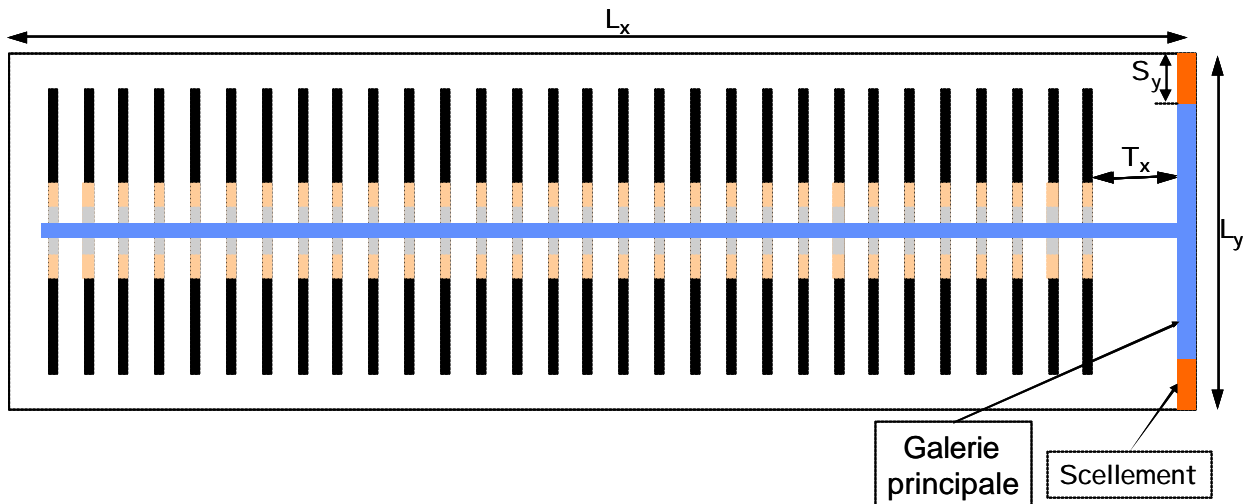


Figure 5 Domaine de calcul dans le plan horizontal (X, Y)

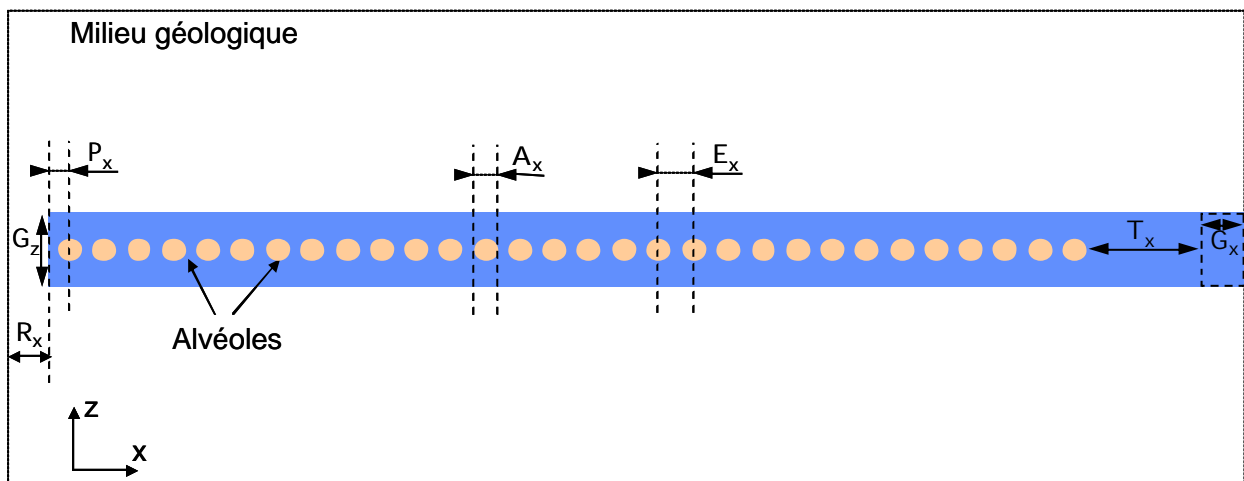


Figure 6 Domaine de calcul dans le plan vertical (X, Z)

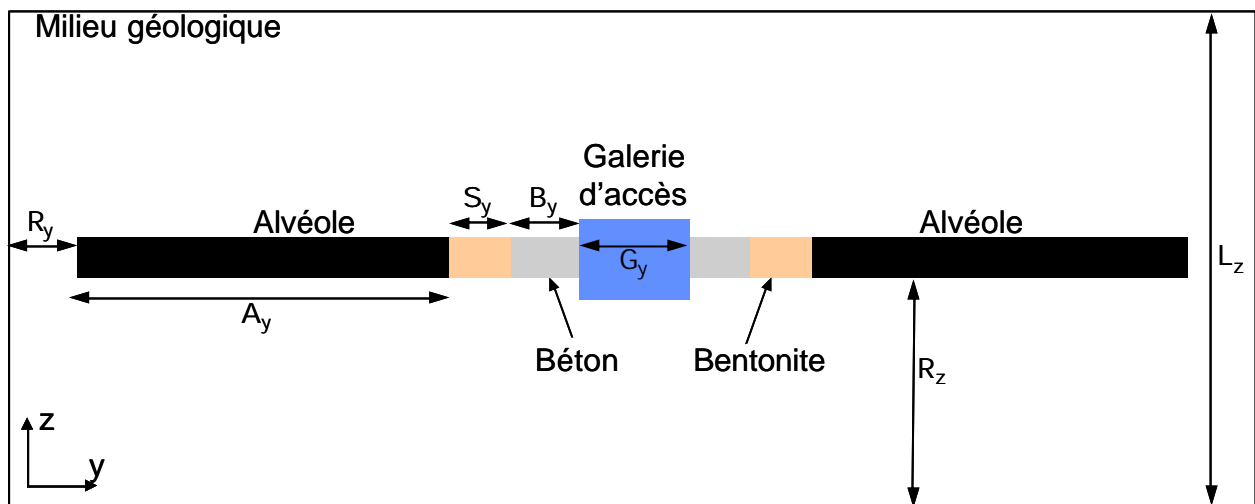


Figure 7 Domaine de calcul dans le plan vertical (Y, Z)

Tableau 1 Dimension des objets dans le domaine de calcul

Intitulé du paramètre	Paramètre	Valeur
Longueur du massif d'appui béton	B_y	4 m
Longueur du bouchon bentonite	S_y	3 m
Largeur de galerie d'accès	G_y	6 m
Longueur d'alvéole	A_y	30 m
Hauteur de galerie d'accès et de galerie principale	G_z	6 m
Hauteur du domaine de calcul	L_z	130 m
Diamètre d'alvéole	A_x	0.7 m
Entraxe d'alvéoles	E_x	12 m
Distance entre alvéole et galerie principale	T_x	20 m
½ largeur de galerie principale	G_x	3 m
Longueur du domaine de calcul	L_x	392 m
Largeur du domaine de calcul	L_y	100 m
Longueur de scellement	S_y	10 m
	R_y	10 m
	R_z	62 m
	R_x	20 m
	P_x	0,65 m

1.2 CONDITIONS AUX LIMITES

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

$$P_w(x, y, z = 0, t) = 5.510^6 Pa \quad S_w(x, y, z = 0, t) = 1 \quad X_{H_2}^w = 0 \quad x \in [0, 392] \quad y \in [0, 100] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$P_w(x, y, z = 130, t) = 4.210^6 Pa \quad S_w(x, y, z = 130, t) = 1 \quad X_{H_2}^w = 0 \quad x \in [0, 392] \quad y \in [0, 100] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

○ Conditions sur les bords latéraux du domaine de calcul

$$Flux_w(x = 0, y, z, t) = 0 \quad Flux_g(x = 0, y, z, t) = 0 \quad y \in [0, 100] \quad z \in [0, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$Flux_w(x = 392, y, z, t) = 0 \quad Flux_g(x = 392, y, z, t) = 0 \quad y \in [0, 100] \quad z \in [0, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$Flux_w(x, y = 0, z, t) = 0 \quad Flux_g(x, y = 0, z, t) = 0 \quad x \in [0, 389] \quad z \in [0, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$Flux_w(x, y = 100, z, t) = 0 \quad Flux_g(x, y = 100, z, t) = 0 \quad x \in [0, 389] \quad z \in [0, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$Flux_w(x, y = 100, z, t) = 0 \quad Flux_g(x, y = 100, z, t) = 0 \quad x \in [389, 392] \quad z \in [68, 130] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$Flux_w(x, y = 100, z, t) = 0 \quad Flux_g(x, y = 100, z, t) = 0 \quad x \in [389, 392] \quad z \in [0, 62] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$P_w(x, y = 0, z, t) = 4.85 \cdot 10^6 Pa \quad S_w(x, y = 0, z = 0, t) = 1 \quad X_{H_2}^w = 0 \quad x \in [389, 392] \quad z \in [62, 68] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

$$P_w(x, y = 100, z, t) = 4.85 \cdot 10^6 Pa \quad S_w(x, y = 100, z = 0, t) = 1 \quad X_{H_2}^w = 0 \quad x \in [389, 392] \quad z \in [62, 68] \quad t \in [0, t_{fin}]$$

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					
	Alvéole	Béton	Bentonite	Remblai	Scellement	COX
$K_v [m^2]$	0	$1.0 \cdot 10^{-18}$	$1.0 \cdot 10^{-20}$	$6.0 \cdot 10^{-16}$	$1.0 \cdot 10^{-18}$	$5.0 \cdot 10^{-21}$
$K_h [m^2]$	Kv=Kh					$5.0 \cdot 10^{-20}$
Porosité [%]	25	30	35	35	30	15
coefficient Emmagasinement spécifique [m^{-1}]	$4.0 \cdot 10^{-06}$	$2.3 \cdot 10^{-06}$	$4.4 \cdot 10^{-06}$	$4.0 \cdot 10^{-06}$	$3.0 \cdot 10^{-06}$	$2.3 \cdot 10^{-06}$
Paramètres diphasiques						
$S_{gr} [\%]$	0	0	0	0	0	0
$S_{wr} [\%]$	1	1	1	1	1	40
Paramètres de Van Genuchten						
n [-]	1.5	1.54	1.61	1.42	1.5	1.49

Paramètre (à 30°C)	Matériaux					
	Alvéole	Béton	Bentonite	Remblai	Scellement	COX
P_r [Pa]	$3 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^6$	$16 \cdot 10^6$	$6 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^6$	$15 \cdot 10^6$
τ (Tortuosité)	1	2	4.5	2	2	2

Les calculs sont isothermes, la température est fixée à 30°C pour toute la durée de simulation.

Les données sur le transfert de l'hydrogène et l'échange entre les phases sont :

- 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 :

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

- Coefficient diffusion de H_2 dissous dans l'eau :

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

- Coefficient diffusion de H_2 dans la vapeur d'eau :
($T_0=303$ K et à $P_0=1.01 \cdot 10^5$ Pa: $D_0=9.5 \cdot 10^{-5}$ m²/s)

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

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

$$D_{H_2}^w = S_w \left(\frac{\mathbf{w}}{\mathbf{t}^2} \right) D_{H_2/EAU}$$

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

$$D_{H_2/vap}^g = (1 - S_w) \left(\frac{\mathbf{w}}{\mathbf{t}^2} \right) D_{H_2-H_2O}^g$$

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

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

1.4 CONDITIONS INITIALES :

Saturations en eau:

- Dans le Callovo-Oxfordien la saturation en eau est de 100%.
- Dans le béton du massif d'appui, la saturation en eau est de 70%.
- Dans le bouchon de bentonite, la saturation en eau est de 70%.
- Dans les galeries, la saturation en eau est de 70%.
- Dans les scellements de galerie, la saturation en eau est de 70%.

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 :

Le terme de production d'hydrogène est à distribuer sur la surface externe de chaque alvéole.

- Pour $0 < t \leq 4500$ ans, $Q_{H_2}^g = 100 \text{ mol / an / alvéole}$ $Q_{H_2}^w = 0$
- Pour $4500 < t \leq 20\ 000$ ans $Q_{H_2}^g = 15 \text{ mol / an / alvéole}$ $Q_{H_2}^w = 0$
- Pour $20\ 000 < t < 50\ 000$ ans $Q_{H_2}^g = 1 \text{ mol / an / alvéole}$ $Q_{H_2}^w = 0$
- Pour $t > 50\ 000$ 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 le cas 2 sont :

- Le temps nécessaire à la disparition de la phase gazeuse (saturation inférieure à 0,01% dans tout le domaine),
- Les flux d'hydrogènes à travers les limites supérieures et inférieures du domaine de calcul et à travers plusieurs surfaces en fonction du temps :
 - $\text{Flux}_{H_2}(t)$ pour $0 < x < 392\text{m}$, $0 < y < 100\text{m}$, $z=0\text{m}$
 - $\text{Flux}_{H_2}(t)$ pour $0 < x < 392\text{m}$, $0 < y < 100\text{m}$, $z=130\text{m}$

- $\text{Flux}_{\text{H}_2}(t)$ pour $389 < x < 392\text{m}$, $y=0$, $62 < z < 68\text{m}$
 - $\text{Flux}_{\text{H}_2}(t)$ pour $x=100\text{m}$, $47 < y < 53\text{m}$, $62 < z < 68\text{m}$
 - $\text{Flux}_{\text{H}_2}(t)$ pour $x=250\text{m}$, $47 < y < 53\text{m}$, $62 < z < 68\text{m}$
 - $\text{Flux}_{\text{H}_2}(t)$ pour $x=370\text{m}$, $47 < y < 53\text{m}$, $62 < z < 68\text{m}$
- La saturation en eau, la pression de gaz, la pression d'eau la fraction massique d'hydrogène en fonction du temps en 9 points :
 - $(25, 50, 65)$, $(50, 50, 65)$, $(150, 50, 65)$, $(250, 50, 65)$, $(375, 50, 65)$, $(390, 30, 65)$, $(380, 35, 65)$, $(147, 30, 65)$, $(196, 50, 70)$
 - La position du front de saturation en gaz dans l'argilite en fonction du temps dans le plan $x=186\text{ m}$ et dans le plan $y=50\text{ m}$ (la position du front est déterminée au point où la saturation en gaz est inférieure à 0,01%).
 - Des cartes d'isovaleurs de pression de gaz, de pression d'eau et de saturation en gaz en $z=65\text{m}$, $y=50\text{m}$, $y=30\text{m}$, $x=196\text{m}$, aux temps 0, 1000, 2000, 3000, 4500, 5000, 7500, 10 000, 20 000, 40 000, 50 000, 70 000, t_{fin} .

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

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 ($kg.m^{-3}.s^{-1}$).

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 : $P_{vap}^g(T, S_w) = P_{sat}(T)$.