

# **Modélisation et analyse des écoulements diphasiques/multicomposants en milieu poreux**

**Andro Mikelić**

Université de Lyon, Lyon, F-69003, France;

Université Lyon 1, Institut Camille Jordan,

UFR Mathématiques, Site de Gerland

50, avenue Tony Garnier, 69367 Lyon Cedex 07

# Remerciements:

1. Cette recherche a bénéficié d'un support financier du GDR MOMAS (Modélisation Mathématique et Simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires: 2439 - ANDRA, BRGM, CEA, EDF, CNRS) au sein du projet "*Changements d'échelle dans la modélisation du transport multiphasique et réactif en milieux poreux : application aux milieux fracturés et aux argiles.*".

# Conservation 1

## Les lois de conservation pour les systèmes multi-espèces

Une hypothèse fondamentale de la théorie des mélanges est que chaque point de l'espace, occupé par le mélange, est en effet occupé par une particule qui appartient à chaque espèce.

$X^i, i = 1, \dots, n$ , est une particule typique, qui appartient à chaque espèce dans la configuration initiale.

Le mouvement de chaque espèce est donné par

$x = \chi^i(X^i, t)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Pour chaque  $i$ ,  $\chi^i$  est bijective et continue.

La vitesse de chaque particule est  $v^i = \frac{\partial \chi^i}{\partial t}$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

# Conservation 1

## Les lois de conservation pour les systèmes multi-espèces

Une hypothèse fondamentale de la théorie des mélanges est que chaque point de l'espace, occupé par le mélange, est en effet occupé par une particule qui appartient à chaque espèce.

$X^i, i = 1, \dots, n$ , est une particule typique, qui appartient à chaque espèce dans la configuration initiale.

Le mouvement de chaque espèce est donné par

$x = \chi^i(X^i, t)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Pour chaque  $i$ ,  $\chi^i$  est bijective et continue.

La vitesse de chaque particule est  $v^i = \frac{\partial \chi^i}{\partial t}$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

$\rho_R^i$  – la densité de l' $i$ -ème espèce dans la configuration initiale et  $\rho^i$  – la densité de l' $i$ -ème espèce dans la configuration actuelle.

# Conservation 2

La densité massique totale du mélange est  $\rho = \sum_{i=1}^n \rho^i$  et la vitesse moyenne pondérée du mélange est  $v = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^n \rho^i v^i$ .

## Conservation de la masse – la configuration Eulerienne

Notation (la dérivée particulaire):

$$\frac{D^{(i)}\varphi}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} (\chi^i(X^i, t), t) |_{X^i \text{ fixe}} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (v^i \cdot \nabla) \varphi$$

$$\frac{D^{(i)}\rho^i}{Dt} + \rho^i \operatorname{div} v^i = m^i \quad \text{équation de continuité pour l'espèce } i \quad (1)$$

# Conservation 2

La densité massique totale du mélange est  $\rho = \sum_{i=1}^n \rho^i$  et la vitesse moyenne pondérée du mélange est  $v = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^n \rho^i v^i$ .

## Conservation de la masse – la configuration Eulerienne

Notation (la dérivée particulaire):

$$\frac{D^{(i)}\varphi}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} (\chi^i(X^i, t), t) |_{X^i \text{ fixe}} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (v^i \cdot \nabla) \varphi$$

$$\frac{D^{(i)}\rho^i}{Dt} + \rho^i \operatorname{div} v^i = m^i \quad \text{équation de continuité pour l'espèce } i \quad (3)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} v = 0 \quad \text{équation de continuité pour le mélange} \quad (4)$$

# Conservation 3

## Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho^i v^i) + \mathbf{div} (\rho^i v^i \otimes v^i) = \mathbf{Div} (\sigma^i)^T + \rho^i b^i + \mathbf{m}^i + m^i v^i \quad (5)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \mathbf{Div} \left[ \sigma^T - \sum_{i=1}^n (\rho^i v^i \otimes v^i) \right] + \sum_{i=1}^n (\mathbf{m}^i + m^i v^i) + \sum_{i=1}^n (\rho^i b^i) \quad (6)$$

# Conservation 3

## Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho^i v^i) + \mathbf{div} (\rho^i v^i \otimes v^i) = \mathbf{Div} (\sigma^i)^T + \rho^i b^i + \mathbf{m}^i + m^i v^i \quad (7)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \mathbf{Div} \left[ \sigma^T - \sum_{i=1}^n (\rho^i v^i \otimes v^i) \right] + \sum_{i=1}^n (\mathbf{m}^i + m^i v^i) + \sum_{i=1}^n (\rho^i b^i) \quad (8)$$

la conservation du moment angulaire implique

$$\sum_{i=1}^n ((\sigma^i)^T - \sigma^i) = 0.$$

# Conservation 4

## Conservation de l'énergie

Soient  $\varepsilon^i$ ,  $q^i$ ,  $r^i$  l'énergie interne, le vecteur flux de chaleur et l'apport de chaleur par la radiation, respectivement, pour l'espèce  $i$ . On a

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho^i \varepsilon^i) + \mathbf{div} (\rho^i \varepsilon^i v^i) = - \mathbf{div} q^i + \mathbf{tr} (\sigma^i \nabla v^i) + \rho^i r^i + \varepsilon_s^i + m^i \varepsilon^i \quad (9)$$

On pose

$$\rho \varepsilon = \sum_{i=1}^n \rho^i \varepsilon^i; \quad q = \sum_{i=1}^n q^i; \quad h = q + \sum_{i=1}^n \rho^i \varepsilon^i (v^i - v); \quad \rho r = \sum_{i=1}^n \rho^i r^i \quad (10)$$

# Conservation 4

## Conservation de l'énergie

Soient  $\varepsilon^i$ ,  $q^i$ ,  $r^i$  l'énergie interne, le vecteur flux de chaleur et l'apport de chaleur par la radiation, respectivement, pour l'espèce  $i$ . On a

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho^i \varepsilon^i) + \mathbf{div} (\rho^i \varepsilon^i v^i) = - \mathbf{div} q^i + \mathbf{tr} (\sigma^i \nabla v^i) + \rho^i r^i + \varepsilon_s^i + m^i \varepsilon^i \quad (11)$$

On pose

$$\rho \varepsilon = \sum_{i=1}^n \rho^i \varepsilon^i; \quad q = \sum_{i=1}^n q^i; \quad h = q + \sum_{i=1}^n \rho^i \varepsilon^i (v^i - v); \quad \rho r = \sum_{i=1}^n \rho^i r^i \quad (12)$$

Si on suppose  $\sum_{i=1}^n [\varepsilon_s^i + m^i (\varepsilon^i + |v^i|^2/2) + m^i \cdot v^i] = 0$ , on trouve

# Conservation 5

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \sum_{i=1}^n \left[ \text{tr} (\sigma^i \nabla v^i) - m^i \cdot v^i - m^i |v^i|^2 / 2 \right] - \text{div } h + \rho r. \quad (13)$$

## 2nd principe de la thermodynamique

Soient  $\eta^i$  et  $T^i$  l'entropie spécifique et la temperature absolue de la  $i$ ème espèce, respectivement.

# Conservation 5

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \sum_{i=1}^n \left[ \text{tr} (\sigma^i \nabla v^i) - m^i \cdot v^i - m^i |v^i|^2 / 2 \right] - \text{div } h + \rho r. \quad (15)$$

## 2nd principe de la thermodynamique

Soient  $\eta^i$  et  $T^i$  l'entropie spécifique et la temperature absolue de la  $i$ ème espèce, respectivement.

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{T^i} \left\{ -\rho \frac{D}{Dt} \left( \frac{\rho^i A^i}{\rho} \right) - \rho^i \eta^i \frac{DT^i}{Dt} + \text{tr} [(\sigma^i - \rho^i (A^i - A)) \nabla v^i] - \right. \\ \left. v^i \cdot \nabla [\rho^i (A^i - A)] - \text{div} (\rho^i A v^i - \rho^i A^i v) + \varepsilon_s^i + m^i \varepsilon^i - \right. \\ \left. \frac{(q^i + \rho^i T^i \eta^i (v^i - v)) \cdot \nabla T^i}{T^i} \right\} \geq 0, \quad (16)$$

# Conservation 6

ou  $A^i = \varepsilon^i - T^i \eta^i$  est l'énergie libre de Helmholtz de la espèce  $i$  et  $A = \sum_{i=1}^n \rho^i A^i / \rho$  est l'énergie libre de Helmholtz du mélange.

Cette théorie générale est difficile à utiliser. On peut consulter les travaux de Truesdell, Rajagopal, Hassanizadeh ....

# Conservation 6

ou  $A^i = \varepsilon^i - T^i \eta^i$  est l'énergie libre de Helmholtz de la espèce  $i$  et  $A = \sum_{i=1}^n \rho^i A^i / \rho$  est l'énergie libre de Helmholtz du mélange.

Cette théorie générale est difficile à utiliser. On peut consulter les travaux de Truesdell, Rajagopal, Hassanizadeh ....

## Equations de continuité pour un mélange binaire

$\omega_i = \rho^i / \rho$  – la fraction massique de l'espèce  $i$ . La loi de Fick:

$$\rho^i v^i = \omega_i \rho v - \rho \mathcal{D}_{ij} \nabla \omega_i, \quad j_i = -\rho \mathcal{D}_{ij} \nabla \omega_i, \quad i, j = 1, 2. \quad (18)$$

Maintenant nous écrivons les équations (1), (6), (10) dans la forme

# Conservation 6

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} = - \mathbf{div} \{ \rho^i v + j_i \} + r^i \quad (19)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = - \mathbf{Div} \left[ (pI + \tau) + (\rho v \otimes v) \right] + \sum_{i=1}^n (\rho^i g_i) \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho(\varepsilon + |v|^2/2))}{\partial t} = & - \mathbf{div} (\rho(\varepsilon + |v|^2/2)v + q + (pI + \tau)v) \\ & - \mathbf{div} h + \rho r \end{aligned} \quad (21)$$

# Conservation 6

$$\frac{\partial \rho^i}{\partial t} = - \mathbf{div} \{ \rho^i v + j_i \} + r^i \quad (22)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = - \mathbf{Div} \left[ (pI + \tau) + (\rho v \otimes v) \right] + \sum_{i=1}^n (\rho^i g_i) \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho(\varepsilon + |v|^2/2))}{\partial t} = & - \mathbf{div} (\rho(\varepsilon + |v|^2/2)v + q + (pI + \tau)v) \\ & - \mathbf{div} h + \rho r \end{aligned} \quad (24)$$

Pour utiliser les équations (19)-(21), il faut spécifier les flux.  
D'après Bird, Stewart et Lightfoot, "Transport Phenomena",  
J. Wiley, 1960,

# Conservation 7

$$\tau = -\mu D(v) + \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} v I \quad (25)$$

$$q = q^{(c)} + q^{(d)} + q^{(x)} \quad (26)$$

avec

# Conservation 7

$$\tau = -\mu D(v) + \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} vI \quad (27)$$

$$q = q^{(c)} + q^{(d)} + q^{(x)} \quad (28)$$

avec

- $q^{(c)} = -k\nabla T$  – le flux convectif
- $q^{(d)} = \sum_{i=1}^n \frac{\bar{H}_i}{M_i} j_i$  – le flux d'énergie causé par l'interdiffusion
- $q^{(x)}$  – le flux de Dufour (l'effet "thermo-diffusif")

$M_i$  est le poids moléculaire de l'espèce  $i$  et  $H = \varepsilon + pV$  est l'enthalpie.

# Conservation 8

Soit  $c_i = \rho^i / M_i$  la concentration molaire de l'espèce  $i$  et  $c = c_1 + c_2$  la densité molaire du mélange. Le flux massique  $j_i = j_i^{(x)} + j_i^{(p)} + j_i^{(g)} + j_i^{(T)}$ :

# Conservation 8

Soit  $c_i = \rho^i / M_i$  la concentration molaire de l'espèce  $i$  et  $c = c_1 + c_2$  la densité molaire du mélange. Le flux massique

$$j_i = j_i^{(x)} + j_i^{(p)} + j_i^{(g)} + j_i^{(T)}:$$

•  $j_i^{(x)} = \frac{c^2}{\rho RT} \sum_{j=1}^n M_i M_j \mathcal{D}_{ij} \left[ \frac{c_j}{c} \sum_{k=1, k \neq j}^n \left( \frac{\partial \bar{G}_j}{\partial x_k} \right) (T, p, c_s; s \neq j, k) \nabla \frac{c_k}{c} \right]$  – la diffusion ordinaire

•  $j_i^{(p)} = \frac{c^2}{\rho RT} \sum_{j=1}^n M_i M_j \mathcal{D}_{ij} \left[ \frac{c_j}{c} M_j \left( \frac{\bar{V}_j}{M_j} - \frac{1}{\rho} \right) \nabla p \right]$  – la diffusion causée par la pression

•  $j_i^{(g)} = -\frac{c^2}{\rho RT} \sum_{j=1}^n M_i M_j \mathcal{D}_{ij} \left[ \frac{c_j}{c} M_j \left( g_j - \sum_{k=1}^n \frac{\rho^k}{\rho} g_k \right) \right]$  – la diffusion forcée

•  $j_i^{(T)} = -\mathcal{D}_i^T \nabla \log T$  – la diffusion thermique

# Conservation 9

$\bar{G}_j$  est l'énergie libre de Gibbs molaire de l'espèce  $i$ ,

$$G = H - TS.$$

Pour les systèmes binaires

# Conservation 9

$\bar{G}_j$  est l'énergie libre de Gibbs molaire de l'espèce  $i$ ,  
 $G = H - TS$ .

Pour les systèmes binaires

$$j_1 = -j_2 = -\frac{c^2}{\rho RT} M_1^2 M_2 \mathcal{D}_{12} \frac{c_1}{c} \left[ \left( \frac{\partial \bar{G}_1}{\partial z} \Big|_{z=c_1/c} \right)_{(T,p)} \nabla \frac{c_k}{c} - \frac{\rho_2}{\rho} (g_1 - g_2) + \left( \frac{\bar{V}_1}{M_1} - \frac{1}{\rho} \right) \nabla p \right] - \mathcal{D}_i^T \nabla \log T \quad (30)$$

Le dernier term décrit l'effet Soret.

# Conservation diphasique 1

## **2 phases/plusieurs composantes en milieu poreux**

On s'intéresse ici à la modélisation de l'écoulement de deux phases lors des transferts de gaz dans un stockage de déchets radioactifs.

On sait qu'il aura lieu une production importante d'hydrogène par corrosion des matériaux métalliques, dans les lieux de stockage. Il faudra pouvoir répondre aux questions concernant le comportement qualitatif et quantitatif du gaz transféré et de fournir les prédictions nécessaires pendant toute la phase de production de gaz (approximativement 100000 ans).

# Conservation diphasique 1

## **2 phases/plusieurs composantes en milieu poreux**

On s'intéresse ici à la modélisation de l'écoulement de deux phases lors des transferts de gaz dans un stockage de déchets radioactifs.

On sait qu'il aura lieu une production importante d'hydrogène par corrosion des matériaux métalliques, dans les lieux de stockage. Il faudra pouvoir répondre aux questions concernant le comportement qualitatif et quantitatif du gaz transféré et de fournir les prédictions nécessaires pendant toute la phase de production de gaz (approximativement 100000 ans).

Nous suivrons la modélisation générale présentée dans [A85] Myron B. Allen, *Numerical modelling of multiphase flow in porous media*, Adv. Water Resources, Vol. 8 (1985),

# Conservation diphasique 2

On considère que le fluide est constitué de deux phases immiscibles, l'eau et la phase gazeuse. Dans chaque phase il réside un nombre des espèces chimiques. En suivant [A85] nous utilisons le glossaire suivant:

# Conservation diphasique 2

On considère que le fluide est constitué de deux phases immiscibles, l'eau et la phase gazeuse. Dans chaque phase il réside un nombre des espèces chimiques. En suivant [A85] nous utilisons le glossaire suivant:

- $\rho_i^\alpha$  = la densité massique intrinsèque de l'espèce  $i$  dans la phase  $\alpha$ ,  $\alpha = \ell, g$ .
- $\rho^\alpha = \sum_{i=1}^N \rho_i^\alpha$  = la densité massique intrinsèque de la phase  $\alpha$
- $\omega_i^\alpha = \frac{\rho_i^\alpha}{\rho^\alpha}$  = la fraction massique de l'espèce  $i$  dans la phase  $\alpha$ ,  $\alpha = \ell, g$ .
- $\phi_\alpha$  = la fraction volumique de la phase  $\alpha$ ,  
 $\phi_\ell + \phi_g = \phi \leq 1$ .

# Conservation diphasique 3

- $S_\alpha = \frac{\phi_\alpha}{\phi} =$  la saturation de la phase  $\alpha$
- $\rho = \phi(S_\ell \rho^\ell + S_g \rho^g) =$  la densité massique du fluide
- $\omega_i = \frac{\phi}{\rho}(S_\ell \rho^\ell \omega_i^\ell + S_g \rho^g \omega_i^g) =$  la fraction massique de l'espèce  $i$  dans le fluide
- $\vec{v}_i^\alpha =$  la vitesse de l'espèce  $i$  dans la phase  $\alpha$
- $\vec{v}^\alpha = \frac{1}{\rho^\alpha} \sum_{i=1}^N \rho_i^\alpha \vec{v}_i^\alpha =$  la vitesse barycentrique de la phase  $\alpha$
- $\vec{u}_i^\alpha = \vec{v}_i^\alpha - \vec{v}^\alpha =$  la vitesse de diffusion de l'espèce  $i$  dans la phase  $\alpha$

Notons que

# Conservation diphasique 4

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = \sum_{i=1}^N \omega_i^\alpha = S_\ell + S_g = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^N \vec{u}_i^\alpha = 0.$$

D'après la théorie des mélanges, chaque espèce satisfait la loi de conservation de la masse

$$\partial_t(\phi S_\alpha \rho^\alpha \omega_i^\alpha) + \nabla \cdot (\phi S_\alpha \rho^\alpha \omega_i^\alpha \vec{v}^\alpha) + \nabla \cdot \vec{j}_i^\alpha = r_i^\alpha, \quad (31)$$

# Conservation diphasique 4

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = \sum_{i=1}^N \omega_i^\alpha = S_\ell + S_g = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^N \vec{u}_i^\alpha = 0.$$

D'après la théorie des mélanges, chaque espèce satisfait la loi de conservation de la masse

$$\partial_t(\phi S_\alpha \rho^\alpha \omega_i^\alpha) + \nabla \cdot (\phi S_\alpha \rho^\alpha \omega_i^\alpha \vec{v}^\alpha) + \nabla \cdot \vec{j}_i^\alpha = r_i^\alpha, \quad (32)$$

où  $\vec{j}_i^\alpha = \phi S_\alpha \rho^\alpha \omega_i^\alpha \vec{u}^\alpha$  est le flux de la diffusion de l'espèce  $i$  dans la phase  $\alpha$ , et  $r_i^\ell + r_i^g = 0$ . En faisant la somme par rapport à  $\alpha$ , nous trouvons pour chaque espèce:

# Conservation diphasique 5

$$\partial_t(\rho\omega_i) + \nabla \cdot (\phi(S_\ell \rho^\ell \omega_i^\ell \vec{v}^\ell + S_g \rho^g \omega_i^g \vec{v}^g)) + \nabla \cdot (\vec{j}_i^\ell + \vec{j}_i^g) = 0, \quad (33)$$

En plus, pour chaque phase nous avons la conservation de la quantité du mouvement, qui s'écrit comme

# Conservation diphasique 5

$$\partial_t(\rho\omega_i) + \nabla \cdot (\phi(S_\ell \rho^\ell \omega_i^\ell \vec{v}^\ell + S_g \rho^g \omega_i^g \vec{v}^g)) + \nabla \cdot (\vec{j}_i^\ell + \vec{j}_i^g) = 0, \quad (35)$$

En plus, pour chaque phase nous avons la conservation de la quantité du mouvement, qui s'écrit comme

$$\phi_\alpha \rho^\alpha \left( \frac{\partial \vec{v}^\alpha}{\partial t} + (\vec{v}^\alpha \nabla) \vec{v}^\alpha \right) - \text{Div } \mathbf{T}^\alpha - \phi_\alpha \rho^\alpha \vec{b}^\alpha = \vec{m}^\alpha, \quad (36)$$

où  $\mathbf{T}^\alpha$  est le tenseur des contraintes,  $\vec{b}^\alpha$  la densité des forces volumiques et  $\vec{m}^\alpha$  le taux d'échange de la quantité du mouvement entre les phases. En suivant [A85], nous posons  $\mathbf{T}^\alpha = -p_\alpha \mathbf{I}$ , où  $p_\alpha$  est la pression mécanique dans la phase  $\alpha$  et (34) donne les lois de Darcy phasiques:

# Conservation diphasique 6

$$\vec{v}^\alpha = -\frac{\Lambda_\alpha}{\phi S_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho^\alpha g \nabla Z), \quad \alpha = \ell, g, \quad (37)$$

où le tenseur de mobilité  $\Lambda_\alpha$  est donné par  $\Lambda_\alpha = \frac{\mathbf{K} k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ .  $\mathbf{K}$  est le tenseur de perméabilité absolue,  $k_{r\alpha}$  sont les perméabilités relatives et  $\mu_\alpha$  sont les viscosités phasiques. Pour fermer notre système des équations, il faut imposer:

# Conservation diphasique 6

$$\vec{v}^\alpha = -\frac{\Lambda_\alpha}{\phi S_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho^\alpha g \nabla Z), \quad \alpha = \ell, g, \quad (38)$$

où le tenseur de mobilité  $\Lambda_\alpha$  est donné par  $\Lambda_\alpha = \frac{\mathbf{K} k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}$ .  $\mathbf{K}$  est le tenseur de perméabilité absolue,  $k_{r\alpha}$  sont les perméabilités relatives et  $\mu_\alpha$  sont les viscosités phasiques. Pour fermer notre système des équations, il faut imposer:

- $k_{rw}$  et  $k_{rg}$  comme fonction de  $S_\ell$
- la pression capillaire  $p_{cwg}$  comme fonction de  $S_\ell$
- $\rho_i^\alpha = \rho_i^\alpha(\omega_1^\alpha, \dots, \omega_{N-1}^\alpha, p_\alpha)$ ,  $\alpha = \ell, g$ ,  $i = 1, \dots, N - 1$
- $\omega_i^\alpha = \omega_i^\alpha(\omega_1, \dots, \omega_{N-1}, \rho^\alpha)$ ,  $\alpha = \ell, g$ ,  $i = 1, \dots, N - 1$
- $S_\alpha = S_\alpha(\omega_1, \dots, \omega_{N-1}, p_\alpha)$ ,  $\alpha = \ell, g$ ,  $i = 1, \dots, N - 1$

# Eau-gaz 1

## Le système diphasique eau-gaz

Pour ce système particulier, les équations (31) et (37) donnent

$$\vec{v}^{\ell} = -\frac{\mathbf{K}k_{rw}}{\phi S_{\ell}\mu_{\ell}} (\nabla p_{\ell} - \rho^{\ell} g \nabla Z) \quad (39)$$

$$\vec{v}^g = -\frac{\mathbf{K}k_{rg}}{\phi S_g\mu_g} (\nabla p_g - \rho^g g \nabla Z) \quad (40)$$

$$\partial_t(\phi S_{\ell}\rho^{\ell}) + \nabla \cdot (\phi S_{\ell}\rho^{\ell}\vec{v}^{\ell}) = r^{\ell} \quad (41)$$

$$\partial_t(\phi S_g\rho^g) + \nabla \cdot (\phi S_g\rho^g\vec{v}^g) = r^g \quad (42)$$

# Eau-gaz 1

## Le système diphasique eau-gaz

Pour ce système particulier, les équations (31) et (37) donnent

$$\vec{v}^{\ell} = -\frac{\mathbf{K}k_{rw}}{\phi S_{\ell}\mu_{\ell}} (\nabla p_{\ell} - \rho^{\ell} g \nabla Z) \quad (43)$$

$$\vec{v}^g = -\frac{\mathbf{K}k_{rg}}{\phi S_g\mu_g} (\nabla p_g - \rho^g g \nabla Z) \quad (44)$$

$$\partial_t(\phi S_{\ell}\rho^{\ell}) + \nabla \cdot (\phi S_{\ell}\rho^{\ell}\vec{v}^{\ell}) = r^{\ell} \quad (45)$$

$$\partial_t(\phi S_g\rho^g) + \nabla \cdot (\phi S_g\rho^g\vec{v}^g) = r^g \quad (46)$$

Pour les lois de comportement, voici un choix qui est souvent pris:

# Eau-gaz 2

$$S_\ell + S_g = 1; k_{rw}(S_{we}) = \sqrt{S_{we}} \left[ 1 - (1 - S_{we}^{1/m})^m \right]^2 ;$$

$$S_{we} = \frac{S_\ell - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{gr}}$$

$$k_{rg}(S_{we}) = (1 - S_{we})^{1/p} \left[ 1 - S_{we}^{1/m} \right]^{2m} ;$$

$$p_g - p_\ell = p_{cwg}(S_\ell) = P_r \left( S_{we}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n} \quad (47)$$

# Eau-hydrogène 1

## **Le système diphasique eau-hydrogène**

La phase gazeuse est  $H_2$  et la phase liquide est de l'eau. Pour représenter la migration des gaz, il faut tenir compte de la migration de l'hydrogène dissous dans l'eau par convection/diffusion et de la migration de l'hydrogène en phase gazeuse. Nous suivons la modélisation présentée dans [Peace] D.W. Peaceman, *Fundamentals of numerical reservoir simulation*, Elsevier, Amsterdam, 1977.

# Eau-hydrogène 1

## Le système diphasique eau-hydrogène

La phase gazeuse est  $H_2$  et la phase liquide est de l'eau. Pour représenter la migration des gaz, il faut tenir compte de la migration de l'hydrogène dissous dans l'eau par convection/diffusion et de la migration de l'hydrogène en phase gazeuse. Nous suivons la modélisation présentée dans [Peace] D.W. Peaceman, *Fundamentals of numerical reservoir simulation*, Elsevier, Amsterdam, 1977.

Les équations (31) donnent

$$\begin{aligned} \partial_t(\phi S_\ell \rho^\ell X_{H_2}^\ell + \phi S_g \rho^g X_{H_2}^g) + \nabla \cdot (\phi S_\ell \rho^\ell X_{H_2}^\ell \vec{v}^\ell + \\ \phi S_g \rho^g X_{H_2}^g \vec{v}^g) + \nabla \cdot \left( \vec{j}_{H_2}^\ell + \vec{j}_{H_2}^g \right) = r_{H_2} \end{aligned} \quad (49)$$

# Eau-hydrogène 2

où  $X_{H_2}^g$  est la fraction massique de l'hydrogène dans le gaz. Comme nous négligeons la présence de l'air et du vapeur, nous trouvons que  $X_{H_2}^g = 1$ .  $X_{H_2}^l$  est la fraction massique de l'hydrogène dans l'eau. Pour les lois de comportement, voici un choix qui est souvent pris:

# Eau-hydrogène 2

où  $X_{H_2}^g$  est la fraction massique de l'hydrogène dans le gaz. Comme nous négligeons la présence de l'air et du vapeur, nous trouvons que  $X_{H_2}^g = 1$ .  $X_{H_2}^\ell$  est la fraction massique de l'hydrogène dans l'eau.

Pour les lois de comportement, voici un choix qui est souvent pris:

$$p_g = \frac{RT}{M_{H_2}} \rho^g \quad (\text{la loi de comportement de l'hydrogène}); \quad \vec{j}_{H_2}^\ell = -\phi$$

$$\vec{j}_{H_2}^g = -\phi S_g \rho^g D_{H_2}^g \nabla X_{H_2}^g = 0. \quad (51)$$

Notons que le flux diffusive  $\vec{j}_{H_2}^\ell$  est négligé dans [Peace] et que  $r_{H_2}$  représente un terme source, correspondant à l'injection de l'hydrogène

# Eau-hydrogène 3

Dans le système (39)-(47), les équations (39)-(40) sont conservées. L'équation (42) est remplacée par (48). Il nous reste de modifier l'équation (41). Elle devient

$$\partial_t(\phi S_\ell \rho^\ell X_{H_2O}^\ell) + \nabla \cdot (\phi S_\ell \rho^\ell X_{H_2O}^\ell \vec{v}^\ell) = r^\ell; \quad X_{H_2O}^\ell + X_{H_2}^\ell = 1. \quad (52)$$

# Eau-hydrogène 3

Dans le système (39)-(47), les équations (39)-(40) sont conservées. L'équation (42) est remplacée par (48). Il nous reste de modifier l'équation (41). Elle devient

$$\partial_t(\phi S_\ell \rho^\ell X_{H_2O}^\ell) + \nabla \cdot (\phi S_\ell \rho^\ell X_{H_2O}^\ell \vec{v}^\ell) = r^\ell; \quad X_{H_2O}^\ell + X_{H_2}^\ell = 1. \quad (54)$$

Ce système est incomplet. Pour le compléter on utilise la loi d'Henry et la formule pour la densité de la phase liquide ( $\rho^\ell$ ).

$$\rho^\ell = \rho_{H_2O}^\ell + \rho_{H_2}^\ell \quad (55)$$

On suppose que le température de système reste constante, que la dissolution de l'hydrogène dans l'eau ne change pas de volume, alors,  $\rho_{H_2O}^\ell = \rho_w$ .

# Eau-hydrogène 4

La loi d'Henry donne la liaison (à chaque point de l'espace et du temps  $(x, t)$ ) entre la pression de phase gazeuse  $p^g$  et la concentration  $X_{H_2}^l$  de gaz dissous dans le liquide:

$X_{H_2}^l = H_{H_2}(T)p_g$  (à température donnée, la quantité de gaz dissous à saturation maximale dans un liquide est proportionnelle à la pression du gaz).

# Eau-hydrogène 4

La loi d'Henry donne la liaison (à chaque point de l'espace et du temps  $(x, t)$ ) entre la pression de phase gazeuse  $p^g$  et la concentration  $X_{H_2}^\ell$  de gaz dissous dans le liquide:

$X_{H_2}^\ell = H_{H_2}(T)p_g$  (à température donnée, la quantité de gaz dissous à saturation maximale dans un liquide est proportionnelle à la pression du gaz).

Le système (39)-(40), (47), (48)-(52) + la loi de Henry est un système fermé pour  $S_\ell$  et  $p_g$ .

Il est raisonnable de généralisée la loi de Henry aux grandes valeurs de  $p_g$  par  $\rho_{H_2}^\ell = 1 - e^{-M_{H_2}K_H p_g}$ .

# Maths 1

## Résultats mathématiques autour des équations décrivant un écoulement diphasique gaz –liquide

Donc l'écoulement est décrit par le système des équations non linéaires d'évolution pour la saturation de l'eau et la pression d'hydrogène.

Soit  $S = S_\ell$ . Nous allons utiliser la densité massique de l'hydrogène "renormalisée"  $U = m(S)\rho_{H_2}^l$  dans la phase liquide. On a

$$a = \frac{R^*}{K_H^*} \approx 50; \quad m(S) = S + a(1 - S); \quad \frac{dm}{dS} = 1 - a < 0;$$
$$b(S) = \frac{k_{r\ell}(S)}{\mu_\ell} + a \frac{k_{rg}(S)}{\mu_g}; \quad \rho^g = a\rho_{H_2}^l. \quad (56)$$

# Maths 2

Avec notations

$$A_{11}(S, U) = \mathbf{K} \frac{dp_g}{d\rho_{H_2}^\ell} \rho_{H_2}^\ell \frac{b(S)}{m(S)} + \frac{D_{H_2}^\ell}{m(S)} \frac{\rho_w}{\rho_w + \frac{U}{m(S)}} \quad (57)$$

$$\varphi_1(S, U) = \mathbf{K} \rho_{H_2}^\ell b(S) g \nabla x_2, \quad (58)$$

$$A_{12}(S, U) = \frac{\mathbf{K}U}{m(S)} \left\{ \left( \frac{dp_g}{d\rho_{H_2}^\ell} \rho_{H_2}^\ell b(S) + \frac{D_{H_2}^\ell \rho_w}{\rho_w + \frac{U}{m(S)}} \right) \frac{(a-1)}{m(S)} - P'_c(S) \frac{k_{rw}(S)}{\mu_w} \right\} \quad (59)$$

$$A_{21}(S, U) = \frac{k_{rw}(S)}{\mu_w m(S)} \mathbf{K} \frac{dp_g}{d\rho_{H_2}^\ell} = \frac{1}{M_{H_2} K_H} \frac{\mathbf{K}}{U + m(S)} \frac{k_{rw}(S)}{\mu_w} \quad (60)$$

# Maths 3

$$A_{22}(S, U) = \mathbf{K} \frac{k_{rw}(S)}{\mu_w} \left\{ \frac{dp_g}{d\rho_{H_2}^l} \frac{(a-1)U}{m(S)^2} - P'_c(S) \right\}; \quad (61)$$

$$\varphi_2(S, U) = \mathbf{K} \frac{k_{rw}(S)}{\mu_w} (\rho_w + U/m(S)) g \nabla x_2, \quad (62)$$

le système ((39)-(40), (47), (48)-(52) + la loi de Henry, deviennent

$$\partial_t(\phi U) - \mathbf{div} \{ A_{11}(S, U) \nabla U + A_{12}(S, U) \nabla S \} + \mathbf{div} \varphi_1(S, U) = r_H \quad (63)$$

$$\partial_t(\phi S) - \mathbf{div} (A_{21}(S, U) \nabla U + A_{22}(S, U) \nabla S) + \mathbf{div} \varphi_2(S, U) = \frac{r_w}{\rho_w} \quad (64)$$

# Maths 4

Nous faisons les 2 hypothèses suivantes

**(H1)** Supposons que  $\lim_{S \rightarrow 0,1} P'_c(S)k_{rw}(S)$  existe et qu'elle est différente de zéro.

**(H2)** Supposons qu'il existe une constante  $\beta > 0$  telle que  $\beta k_{rw}(S) < -P'_c(S)$  on  $[0, 1]$ .

En conséquence, on a

- $A_{11}$ ,  $A_{21}$  et  $A_{22}$  sont des fonctions  $C^\infty$  de  $S$  et  $U$  sur  $[0, 1] \times [0, +\infty[$ , prenant valeurs dans les intervalles  $(a_{11,m}, a_{11,M})$ ,  $(0, a_{21,M})$  et  $(a_{22,m}, a_{22,M})$ , respectivement.
- $A_{12} = Ua_{12}(S, U)$ , ou  $a_{12}$  est une fonction  $C^\infty$  de  $S$  et  $U$  sur  $[0, 1] \times [0, +\infty[$ , prenant ses valeurs entre 2 constantes positives,  $a_{12,m}$  et  $a_{12,M}$ .

# Maths 5

- $\varphi_1(S, U) = \chi(U)\Psi_1(S)g\nabla x_2$ , ou  $\Psi_1$  est une fonction bornée  $C^\infty$  et  $\chi$  est une fonction bornée  $C^\infty$  de  $U$  et  $[0, +\infty[$ ), se comportant comme  $U$  pour les petites valeurs small values de  $U$ .
- $\varphi_2(S, U)$  est une fonction bornée  $C^\infty$ .

Ensuite nous supposons:

1.  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  est un ouvert borné. Soit  $V = L^2(0, T; H^1(\Omega))$ ,  $0 < T < +\infty$  et  $Q_T = \Omega \times (0, T)$ .
2. Nous supposons  $S_0 \in W^{1,3}(\Omega)$ ,  $U_0 \in W^{1,3}(\Omega)$ ,  $r_w, r_{H_2} \in L^2(Q_T)$  et  $r_\ell, r_{H_2} \geq 0$ .  $\phi$  est une constante positive.

# Maths 6

**Définition** On dit que  $\{S, U\}$  est une solution faible de système (63)-(64) si on a:  $\{S, U\} \in V^2 \cap L^\infty(Q_T)^2$ ,  $\partial_t\{S, U\} \in (V^*)^2$  et pour chaque  $\{w_1, w_2\} \in V^2$  l'équation variationnelle suivante est satisfaite

$$\int_0^T \langle \partial_t(\phi U), w_1 \rangle dt + \int_0^T \int_\Omega \left\{ A_{11} \nabla U + A_{12} \nabla S - \varphi_1(S, U) \right\} \nabla w_1 dx dt = \int_0^T \int_\Omega r_g w_1 dx dt \quad (65)$$

$$\int_0^T \langle \partial_t(\phi S), w_2 \rangle dt + \int_0^T \int_\Omega \left\{ A_{21} (\nabla U + A_{22} \nabla S - \varphi_2(S, U)) \right\} \nabla w_2 dx dt = \int_0^T \int_\Omega \frac{r_w}{\rho_w} w_2 dx dt \quad (66)$$

# Maths 7

et pour chaque  $w_i \in V \cap W^{1,1}(0, T; L^\infty(\Omega))$ ,  $i = 1, 2$ , avec  $w_i(T) = 0$ ,

$$\int_0^T \langle \partial_t U, w_1 \rangle dt + \int_0^T \int_\Omega (U - U_0) \partial_t w_1 dx dt = 0;$$
$$\int_0^T \langle \partial_t S, w_2 \rangle dt + \int_0^T \int_\Omega (S - S_0) \partial_t w_2 dx dt = 0. \quad (67)$$

Les modèles classiques décrivant des échanges gazeux sont des systèmes paraboliques dégénérés. On peut évoquer de nombreux problèmes décrits par de tels équations ; écoulement d'un gaz compressible à travers un milieu poreux; l'équation de filtration non saturée; équations scalaires décrivant le changement de phase; le problème de Stefan; etc...

# Maths 8

D'un point de vue numérique, nous pouvons considérer les méthodes numériques développées récemment par Eymard, Hilhorst et Vorhalik et, avant, par I.S. Pop et al., qui donnent une réponse satisfaisant aux problèmes pratiques. Néanmoins, il est important de remarquer que les résultats mentionnés dépendent fortement du **principe du maximum**.

Si nous souhaitons étudier des écoulements multiphasiques à travers un milieu poreux, la situation est bien différente. Dans le cas de deux phases immiscible incompressibles une formulation très particulière (voir e.g. le livre Chavent, Jaffré), qui réduit le problème à un système parabolique-elliptique particulier, est possible.

# Maths 8a

Par contre, si une des phases est compressible, cette approche n'est plus possible, sauf si on suppose que la densité du gaz dépende de la pression globale de Chavent (voir les travaux de Galusinski et Saad)

Nous sommes obligés de considérer des systèmes paraboliques dégénérés et le principe du maximum n'est plus valable.

Donc le seul espoir est de proposer une discrétisation temporelle stable, comme dans le cas des problèmes à frontière libre ou avec changement de phase, mais qui ne repose pas sur le principe du maximum.

# Maths 9

Nous proposons d'utiliser l'approche par une discrétisation implicite en temps, introduite dans l'article [AL] Alt, H. W., Luckhaus, S., *Quasilinear elliptic-parabolic differential equations*. Math. Z. 183 (1983), no. 3, 311–341. Elle s'applique aux systèmes paraboliques, qui peuvent dégénérer en équations elliptiques, et qui s'écrivent dans la forme

$$\partial_t b^j(u) - \operatorname{div} (a^j(b(u), \nabla u)) = f^j(b(u)), \quad j = 1, \dots, m. \quad (68)$$

L'idée est d'utiliser l'énergie du système, définie par

$$\int_0^T (\Psi(b(u)) + |\nabla u|^2) \quad (69)$$

# Maths 10

ou  $\Psi(z) = \sup_{\sigma \in \mathbb{R}} \int_0^\sigma (z - b(s)) ds$ ,  $b = \nabla \Phi$ ,  $\Phi \in C^1$  et

$$(a(z, p_1) - a(z, p_2))(p_1 - p_2) \geq c|p_1 - p_2|^2 .$$

$b$  est une application vectorielle monotone. Dans cette situation, on sait, d'après l'article [AL] que la discrétisation totale implicite converge vers une solution.

Cet approche a été utilisé avec succès par Luckhaus et Kröner (J. Diff. Eq) et Alt et DiBenedetto (Annali Scuola Normale Sup Pisa) pour résoudre les EDP décrivant le système eau-huile (2 phases incompressibles).

# Maths 11

Pour notre système

- Soit  $A_{ij}^R(S, U) = A_{ij}(S, \sup\{R, U_+\})$ . Alors il existe  $\mathcal{R} > 0$  tel que pour  $0 < R \leq \mathcal{R}$ , le système (65)-(67), avec la matrice  $[A_{ij}]$  remplacée par  $[A_{ij}^R]$ , admet au moins une solution faible  $\{S^R, U^R\}$ .
- Soient  $r_g, r_w, S_0, U_0 \geq 0, k_{rw}(0) = 0$ . Alors les solutions sont non-negatives.
- Cette solution admet une régularité des gradients plus élevée que  $L^2$
- Nous généralisons l'estimation parabolique de De Giorgi-Nash- Moser

# Maths 12

- En conséquence,  $\max_{x,t} |U(x,t)| < \mathcal{R}$ , si les données pour la pression du gaz sont "suffisamment" petites.
- Donc la solution du problème avec la matrice  $[A_{ij}]$  remplacée par  $[A_{ij}^R]$ , est en effet une solution de notre problème.
- Pour les détails voir la note *A. Mikelic: An existence result for the equations describing a gas-liquid two-phase flow, prépublication, Lyon, février, 2007.*