



Réflexions sur la modélisation et simulation numérique des écoulements multiphasiques en milieu poreux

Florian Caro et Alain Bengaouer

MOMAS, 9 octobre 2006

Plan



1. Modèle d'écoulement diphasique en milieu poreux considéré
 - Hypothèses et lois de fermetures
 - Dégénérescence du modèle
 - Schéma numérique
 - Validation 1D (perméabilité absolue discontinue)
 - Validation 2D (cas homogène)

2. Modèle multiphasique avec dissolution d'hydrogène
 - Hypothèses
 - Alternatives
 - Discrétisation

Notations



| | |
|---------------------|---|
| α | Indice désignant la phase liquide ou la phase gaz ($\alpha = l, g$) |
| S_α | Saturation ($S_g + S_l = 1$) |
| P_α | Pression |
| \mathbf{u}_α | Vitesse |
| Φ | Porosité |
| k_{r_α} | Perméabilité relative |
| k | Perméabilité absolue |
| μ_α | Viscosité |
| ρ_α | Densité |
| P_c | Pression capillaire |
| λ_α | $k_{r_\alpha} / \mu_\alpha$ |

Modèle diphasique



Hypothèses :

1. Conservation de la masse de chaque phase ($\alpha = l, g$)

$$\partial_t(\Phi \rho_\alpha S_\alpha) + \text{div}(\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = Q_\alpha$$

2. Fluides darcéens et gravité négligée

$$\mathbf{u}_\alpha = -k \frac{k_{r_\alpha}}{\mu_\alpha} \nabla P_\alpha$$

3. Pression capillaire entre les pressions de chaque phase

$$P_c = P_g - P_l$$

4. Écoulement isotherme
5. Loi d'état pour la phase gazeuse $P_g = P_g(\rho_g)$
6. Phase liquide incompressible

Lois de fermeture

- Saturation effective

$$S_{l_e} = \frac{S_l - S_{l_r}}{1 - S_{l_r} - S_{g_r}}$$

- Perméabilités relatives (Van Genuchten pour la phase liquide)

$$\begin{cases} k_{r_l} = \sqrt{S_{l_e}} \left[1 - (1 - S_{l_e}^{1/m})^m \right]^2 \\ k_{r_g} = \sqrt{1 - S_{l_e}} (1 - S_{l_e}^{1/m})^{2m} \end{cases}$$

- Pression capillaire

$$P_c = P_r \left(S_{l_e}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n}, \quad m = 1 - 1/n$$

- Loi d'état

$$P_g = \rho_g r T$$

Systeme en saturation liquide et pression de gaz



Les hypothèses 1 – 6 donnent

$$M(S_l, P_g) \partial_t \begin{bmatrix} S_l \\ P_g \end{bmatrix} + \text{div} \left(A(S_l, P_g) \begin{bmatrix} \nabla S_l \\ \nabla P_g \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} Q_l / \rho_l \\ rTQ_g \end{bmatrix}$$

où

$$M(S_l, P_g) = \Phi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -P_g & (1 - S_l) \end{pmatrix}$$

et

$$A(S_l, P_g) = k \begin{pmatrix} -\lambda_l dP_c/dS_l & \lambda_l \\ 0 & \lambda_g P_g \end{pmatrix}$$

Dégénérescence du modèle



A la limite $S_l \rightarrow 1$

- Signification de la pression de gaz ?
- Traitement numérique du passage deux équations à une équation ?
- Dégénérescence vers un système hyperbolique–parabolique (modèle Buckley Leverett)

Deux possibilités

- Troncature de la saturation liquide ou troncature des lois de perméabilités relatives et de pression capillaire
- Réécriture du système en variable globales (*i.e.* qui sont présentes quelle que soit la valeur de la saturation liquide)

Schéma numérique

- Schéma MPFA pour la discrétisation spatiale



$$\begin{cases} \Phi \partial_t S_l - B(S_l) S_l - D(S_l) P_g = \frac{Q_l}{\rho_l} \\ -\Phi P_g \partial_t S_l + \Phi(1 - S_l) \partial_t P_g - E(S_l, P_g) P_g = r T Q_g \end{cases}$$

où B, D, E = matrices de discrétisation en espace

- Schéma d'Euler implicite pour la discrétisation temporelle

$$\begin{cases} \Phi \frac{S_l^{n+1} - S_l^n}{\Delta t} - B(S_l^{n+1}) S_l^{n+1} - D(S_l^{n+1}) P_g^{n+1} = \frac{Q_l}{\rho_l}^{n+1} \\ -\Phi P_g^{n+1} \frac{S_l^{n+1} - S_l^n}{\Delta t} + \Phi(1 - S_l^{n+1}) \frac{P_g^{n+1} - P_g^n}{\Delta t} - E(S_l^{n+1}, P_g^{n+1}) P_g^{n+1} = r T Q_g^{n+1} \end{cases}$$

- Méthode du point fixe pour résoudre le système non linéaire d'inconnues S_l^{n+1} et P_g^{n+1}

Validation 1D (perméabilité absolue discontinue)



Principe de détermination des solutions exactes

- Se donner des fonctions S_l et P_g vérifiant de *bonnes* propriétés
 - principe du maximum
 - limites $t \rightarrow +\infty$
 - conditions aux limites
 - continuité des flux aux discontinuités de k
 - continuité de la solution aux discontinuités de k

- Déterminer Q_l et Q_g et les conditions initiales de tel sorte que ces fonctions soient la solution du problème considéré

Détermination de la solution



- Domaine $(-1, 1)$
- Conditions aux limites de type Dirichlet
- Perméabilité absolue

$$k(x) = \begin{cases} k_1 & \text{dans } (-1, 0) \\ k_2 & \text{dans } (0, 1) \end{cases}$$

- Saturation liquide et pression de gaz

$$\begin{cases} S_l(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \beta e^{-t/\tau} \sin(\pi x) \right) & \text{dans } (-1, 0) \\ \frac{1}{2} \left(1 + \beta e^{-t/\tau} \sin(\pi k_1/k_2 x)(1 - x) \right) & \text{dans } (0, 1) \end{cases} \\ P_g(x, t) = \text{Cste dans } (-1, 1) \end{cases}$$

Constantes physiques



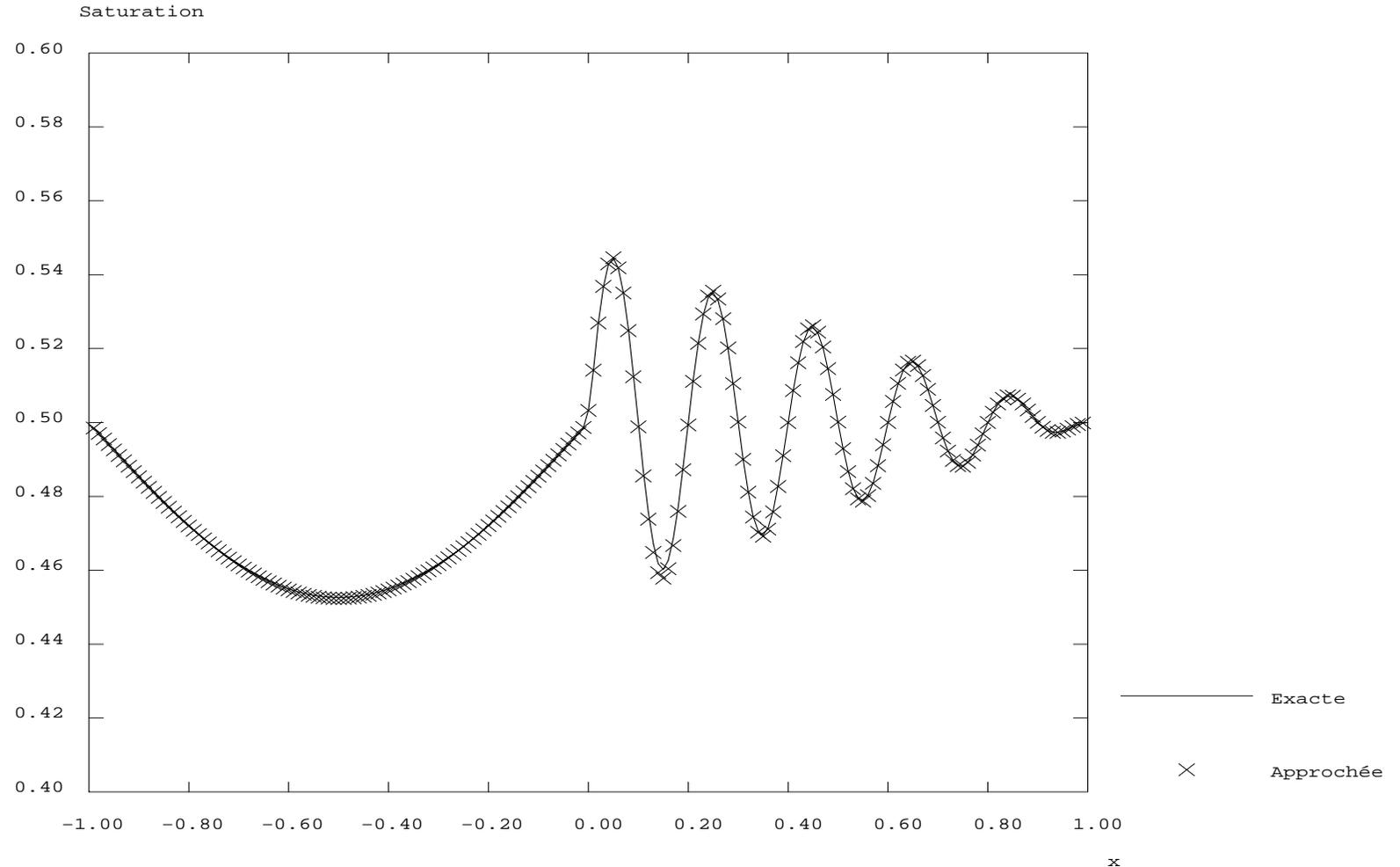
| | Domaine $(-1, 0)$ | Domaine $(0, 1)$ |
|------------------------------------|----------------------|----------------------|
| Perméabilités absolues (m^2) | 10^{-17} | 10^{-18} |
| Viscosité du liquide (Pa.s) | 804×10^{-6} | 804×10^{-6} |
| Viscosité du gaz (Pa.s) | 185×10^{-7} | 185×10^{-7} |
| Porosité | 0.3 | 0.3 |
| S_{w_r} | 0 | 0 |
| S_{g_r} | 0 | 0 |
| P_r (Pa) | 2×10^6 | 2×10^6 |
| Paramètre de Van Genuchten (n) | 1.5 | 1.5 |
| Constante de temps τ (s) | 1.65×10^7 | 1.65×10^7 |

Saturation liquide exacte et approchée

Pas de temps : $\Delta t = 31 \times 10^3 \text{ s}$

Temps final : $T = 31 \times 10^6 \text{ s}$

Nombre de mailles : $N = 200$



Convergence en maillage

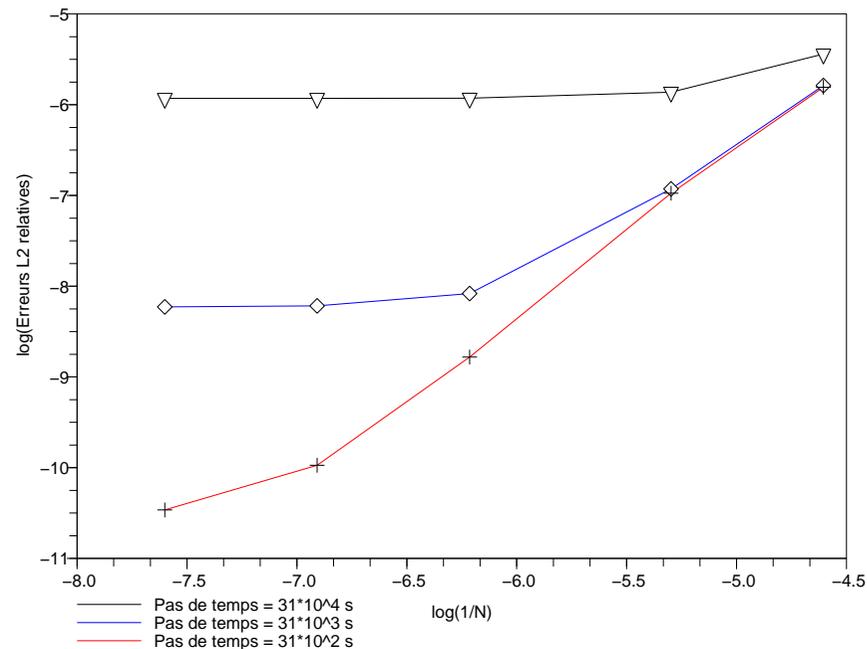
Temps final de la simulation : $T = 31 \times 10^6 \text{ s} \simeq 1 \text{ an}$ ($\tau \simeq 6 \text{ mois}$)

$N \in \{100, 200, 500, 1000, 2000\}$

Représentation de l'erreur relative L^2

$$\varepsilon_N = \frac{\|(S_l, P_g)_{\text{exa}}(T) - (S_l, P_g)_{\text{app}}(T)\|_{L^2}}{\|(S_l, P_g)_{\text{exa}}(T)\|_{L^2}},$$

Erreurs L2 relatives pour différents pas de temps

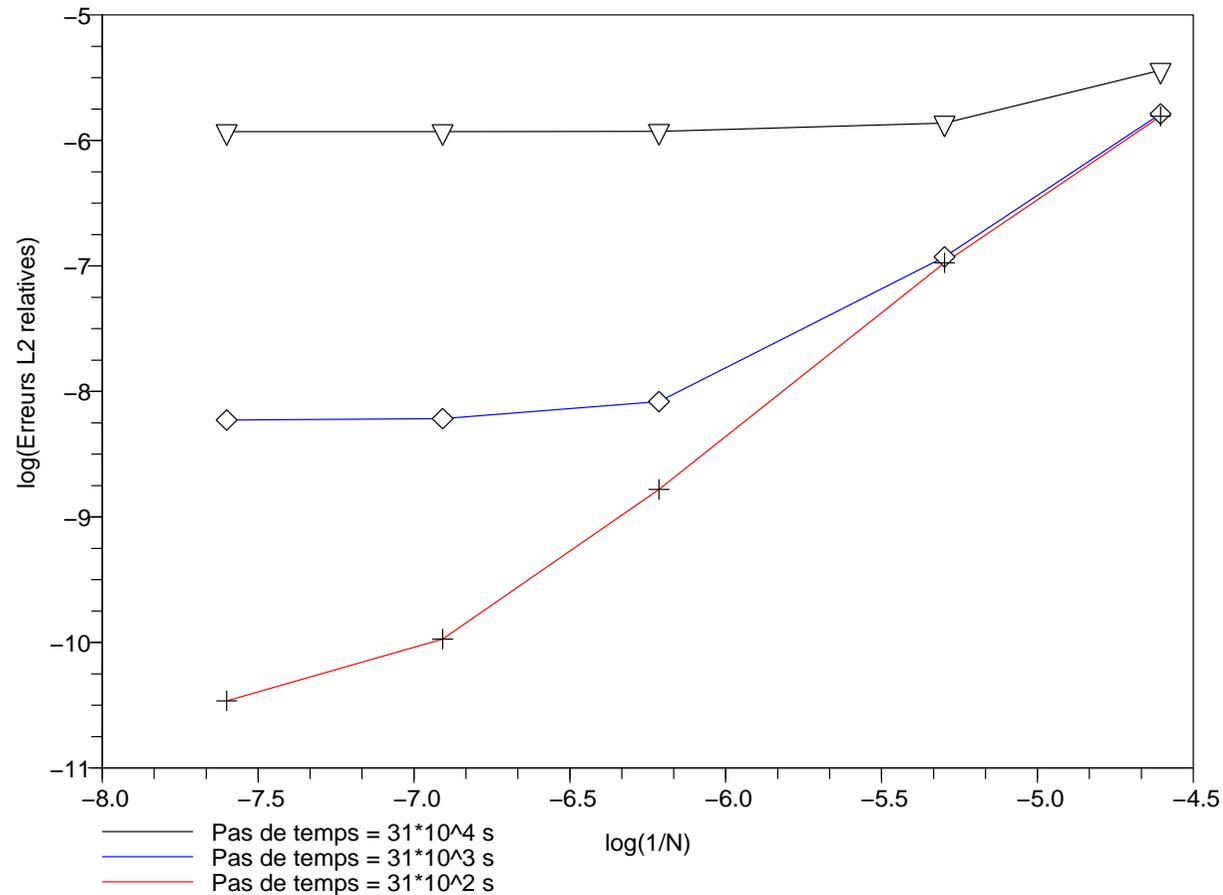


Convergence en maillage

Temps final de la simulation : $T = 31 \times 10^6 \text{ s} \simeq 1 \text{ an}$ ($\tau \simeq 6 \text{ mois}$)
 $N \in \{100, 200, 500, 1000, 2000\}$



Erreurs L2 relatives pour différents pas de temps



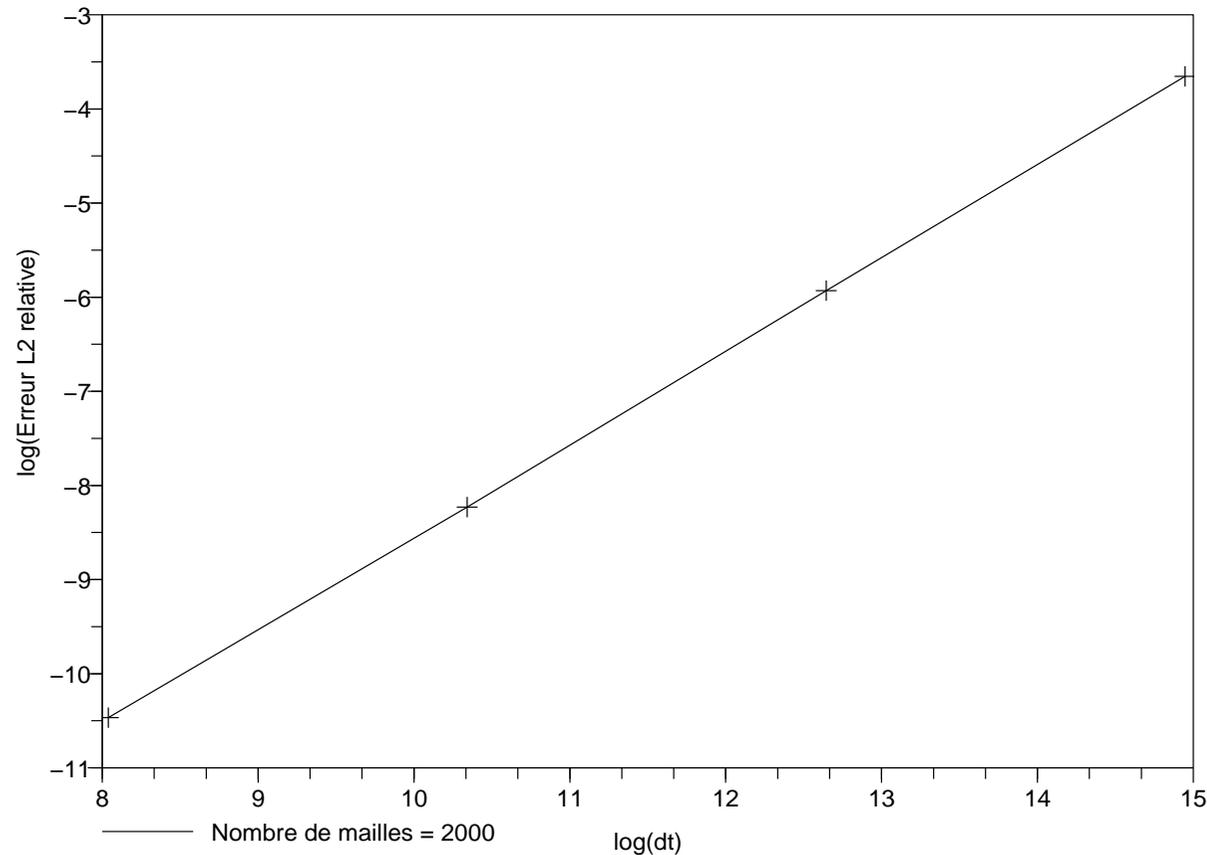
Convergence en temps

Temps final de la simulation : $T = 31 \times 10^6 \text{s} \simeq 1 \text{ an}$ ($\tau \simeq 6 \text{ mois}$)

$\Delta t \in \{31 \times 10^i; i = 5, 1\}$

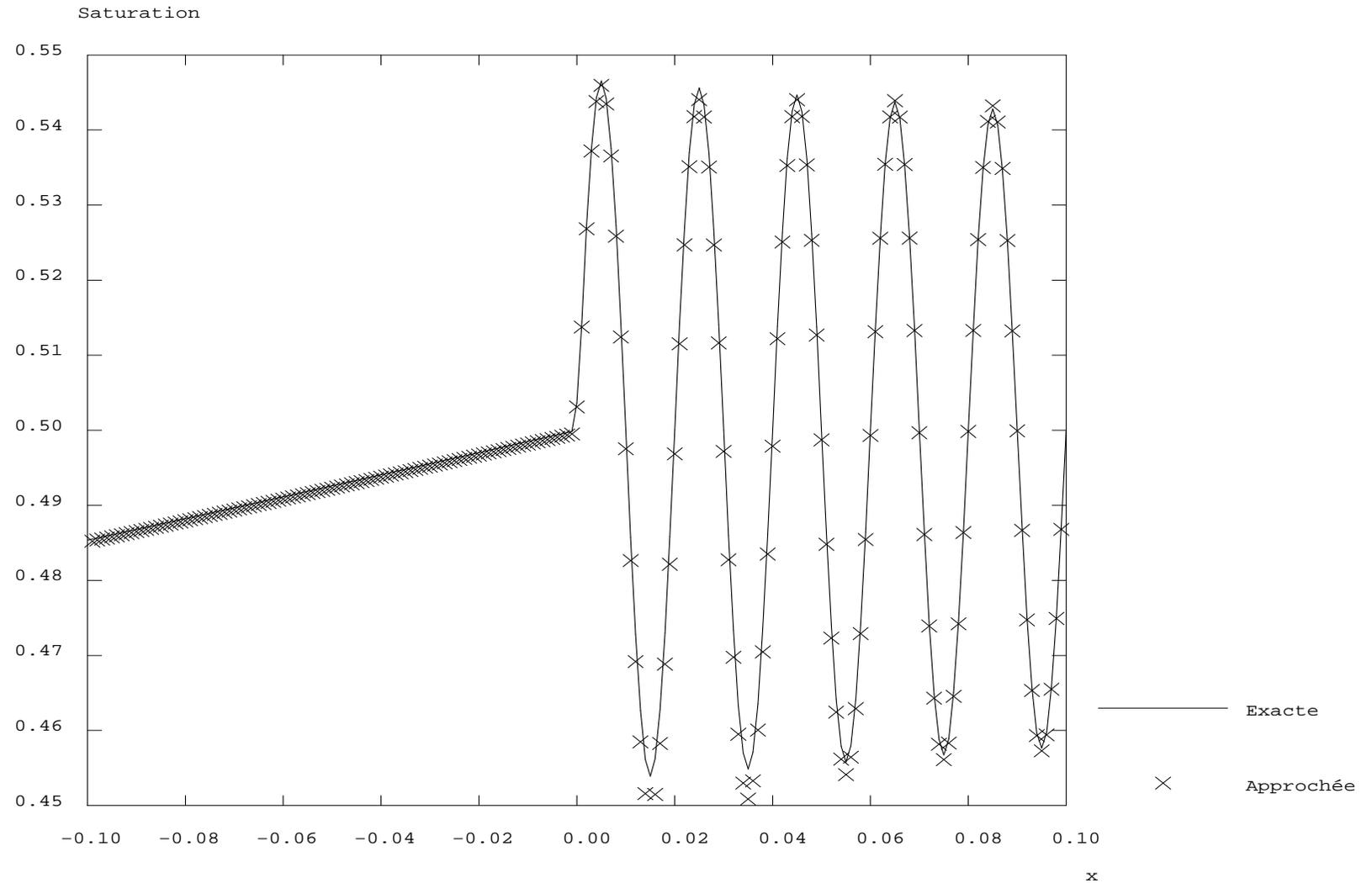


Erreur L2 relative en fonction du pas de temps



Saturation exacte et approchée ; cas où $k_1/k_2 = 100$

Nombre de mailles : $N = 2000$ (période dans $(0, 1)$ 2×10^{-2} m)



Validation 2D (cas homogène)



Principe de détermination d'une solution exacte identique au cas 1D lorsque la perméabilité absolue est discontinue

- Domaine $(-1, 1) \times (-1, 1)$
- Conditions aux limites de type Dirichlet
- Saturation liquide et pression de gaz (E. Villatoro)

$$\begin{cases} S_l(x, t) = S_{\text{lim}} - \frac{(1 - x^2)(1 - y^2)}{d} \times \frac{1 + t/\tau}{1 + t^2/\tau^2} \\ P_g(x, t) = P_0 + \frac{(1 - x^2)(1 - y^2)}{c} \left(1 - \frac{1}{1 + t/\tau} \right) \end{cases}$$

Paramètres physiques



| | |
|---|----------------------|
| Viscosité du liquide (Pa.s) | 804×10^{-6} |
| Viscosité du gaz (Pa.s) | 185×10^{-7} |
| Porosité | 0.3 |
| S_{w_r} | 0 |
| S_{g_r} | 0 |
| P_r (Pa) | 2×10^6 |
| Paramètre de Van Genuchten ((n) | 1.5 |
| Perméabilité absolue ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) | 10^{-17} |
| c (Pa) | 2×10^{-5} |
| d | 2.2 |
| S_{lim} | 0.7 |
| P_0 (Pa) | 5.5×10^6 |
| τ (s) | 31×10^6 |

Convergence en maillage

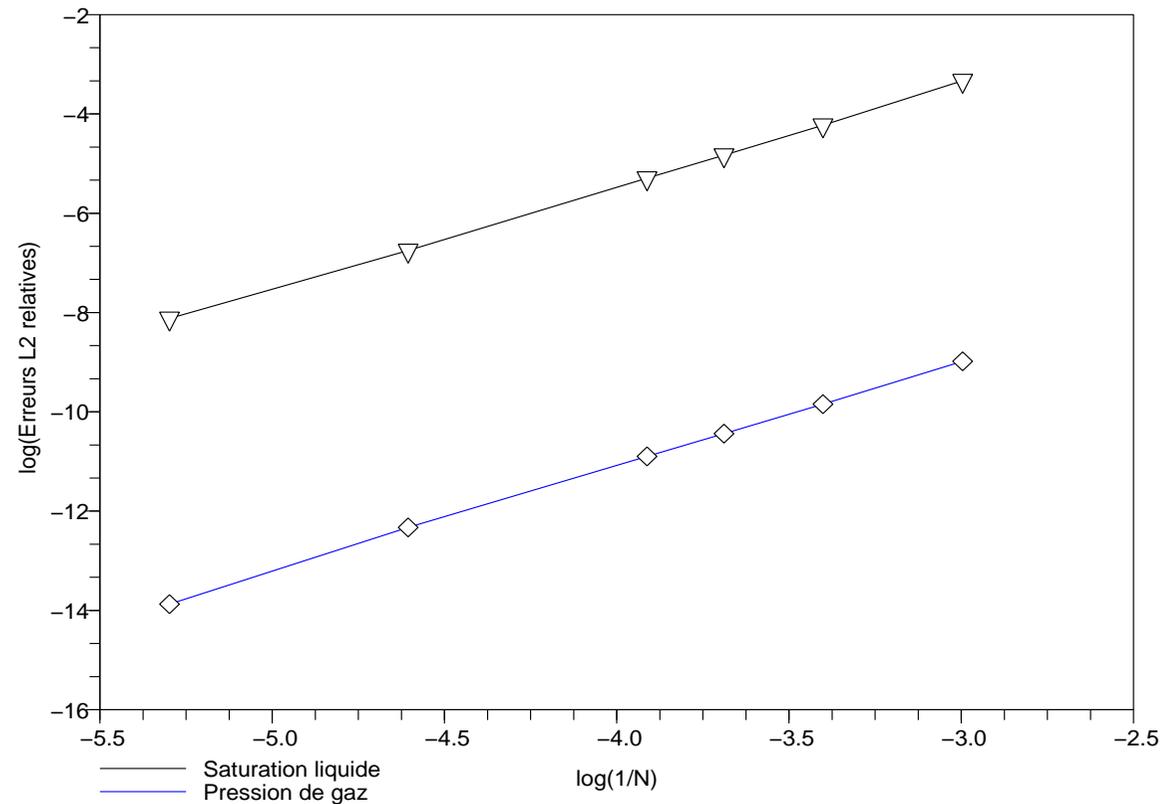
Temps final de la simulation : $T = 31 \times 10^6 \text{s} \simeq 1 \text{ an}$ ($\tau = T$)

Pas de temps : $\Delta t = 31 \times 10^3 \text{s}$

Nombre de mailles : $N \in \{1/20, 1/30, 1/40, 1/50, 1/100, 1/200\}$



Erreurs relatives L2 sur la pression de gaz et la saturation liquide



Modèle diphasique avec dissolution d'hydrogène gazeux (1/2)



Hypothèses : (inspiré du benchmark couplex-gaz ANDRA)

1. Conservation de la masse de chaque phase ($\alpha = l, g$)

$$\partial_t(\Phi \rho_\alpha S_\alpha) + \text{div}(\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = Q_\alpha$$

2. Conservation de la masse pour l'hydrogène dissous et gazeux

$$\partial_t(\Phi S_\alpha \rho_\alpha X_\alpha^{H_2}) + \text{div}(\rho_\alpha X_\alpha^{H_2} \mathbf{u}_\alpha - \rho_\alpha D_\alpha^{H_2} \nabla X_\alpha^{H_2}) + \Omega_{\alpha/\beta}^{H_2} = Q_\alpha^{H_2}$$

où $X_\alpha^{H_2} = \rho_\alpha^{H_2} / \rho_\alpha$ désigne la fraction massique d'hydrogène dissous (pour $\alpha = l$) / gazeux (pour $\alpha = g$).

3. Equilibre entre l'eau liquide et la vapeur d'eau réalisé instantannément

$$P_g^{H_2O} = P^{\text{sat}}(T)$$

4. Ecoulement isotherme
5. Phase liquide incompressible

Modèle diphasique avec dissolution d'hydrogène gazeux (2/2)

Hypothèses :

- 
6. Fluides darcéens et gravité négligée
 7. Pression capillaire : $P_c = P_g - P_l$
 8. Equilibre thermodynamique entre l'hydrogène dissous instantané via la loi de Henry

$$\rho_l X_l^{H_2} = M_{H_2} H_{H_2}(T) P_g^{H_2}$$

9. Loi de Dalton entre les pressions partielles de chaque espèce

$$P_g = P_g^{H_2} + P_g^{H_2O}$$

10. En notant M la masse molaire du mélange gazeux et M^k la masse molaire du composant k dans la phase gazeuse ($k = H_2, H_2O$)

$$\frac{\rho_g}{M} = \frac{\rho_g^{H_2}}{M^{H_2}} + \frac{\rho_g^{H_2O}}{M^{H_2O}},$$

11. Lois d'états pour les pressions partielles P_g^k ($k = H_2, H_2O$)

Inconnues vs équations



Inconnues :

- S_α , $\alpha = l, g$
- ρ_α , $\alpha = l, g$
- $X_\alpha^{H_2}$, $\alpha = l, g$
- ρ_g^k , $k = H_2, H_2O$
- P_α , $\alpha = l, g$
- P_g^k , $k = H_2, H_2O$

soit 12 inconnues

Equations :

- 4 équations différentielles (conservation de la masse)
- 6 équations algébriques (pression capillaire, loi de Henry, loi de Dalton, lois d'état, pression de vapeur saturante)
- condition $S_l + S_g = 1$, définitions $X_\alpha^{H_2} = \rho_\alpha^{H_2} / \rho_\alpha$ pour $\alpha = l, g$ et définition de ρ_g

soit 14 équations

⇒ Système surdéterminé

Deux alternatives possibles



- Réduire le nombre d'équations différentielles
 - Nombre d'équations à discrétiser inférieur et donc temps de calcul réduit
 - Système contraint par des relations algébriques (difficultés dans la résolution du système non linéaire ?)

- Réduire le nombre d'équations algébriques
 - Loi de Henry incompatible avec les deux équations de conservation de la masse sur les fractions massiques d'hydrogène dissous et gazeux
 - Nombre d'équations à discrétiser par rapport à la première alternative supérieur
 - Choix du flux de masse entre H_2 gaz et H_2 liquide ?

Système réduit



- Choix de la première alternative (réduction du nombre d'équations différentielles)
- Par sommation des équations de masse (phase liquide + phase gazeuse et hydrogène dissous + hydrogène gazeux), le système en variable saturation liquide et pression partielle d'hydrogène gazeux s'écrit

$$M(S_l, P_g^{H_2}) \partial_t \begin{bmatrix} S_l \\ P_g^{H_2} \end{bmatrix} + \text{div} \left(A(S_l, P_g^{H_2}) \begin{bmatrix} \nabla S_l \\ \nabla P_g^{H_2} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \sum_{\alpha} Q_{\alpha} \\ \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^{H_2} \end{bmatrix}$$

⇒ Possibilité d'effectuer une discrétisation du même type que pour le modèle diphasique sans dissolution

Conclusions et perspectives



- Présentation d'un modèle d'écoulement diphasique en milieu poreux
 - Validation 1D lorsque la perméabilité absolue est discontinue
 - Validation 2D dans le cas homogène

- Présentation d'un modèle d'écoulement multiphasique en milieu poreux avec dissolution d'hydrogène dans la phase liquide
 - Modèle surdéterminé
 - Relaxation en supprimant des équations différentielles ou algébriques

Conclusions et perspectives



- Présentation d'un modèle d'écoulement diphasique en milieu poreux
 - Traitement numérique de la dégénérescence du modèle

- Présentation d'un modèle d'écoulement multiphasique en milieu poreux avec dissolution d'hydrogène dans la phase liquide
 - Validations numériques
 - Traitement numérique de la dégénérescence du modèle