
**Présentation d'un benchmark sur la simulation des écoulements
biphasiques en milieu poreux:**

**application au transfert des gaz
autour du stockage de déchets radioactifs**

Jean Talandier -Andra

Plan de l'exposé

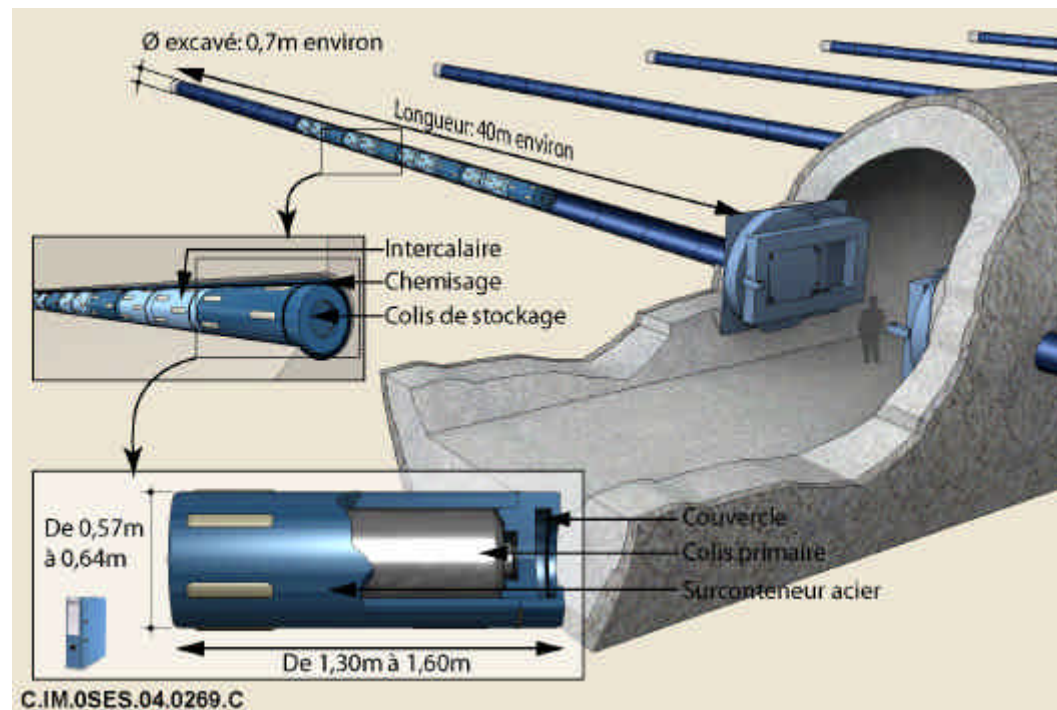
- Description des transferts de gaz dans un stockage de déchets radioactif
- Présentation des modèles de transfert biphasiques
- Objectifs de Couplex Gaz
- Description des cas tests
- Organisation

Contexte (1)

1/ Identification des sources de gaz dans le stockage

Production importante d'hydrogène par corrosion des matériaux métalliques
Origine du métal : Déchets, colis de stockage, surconteneurs, soutènements.

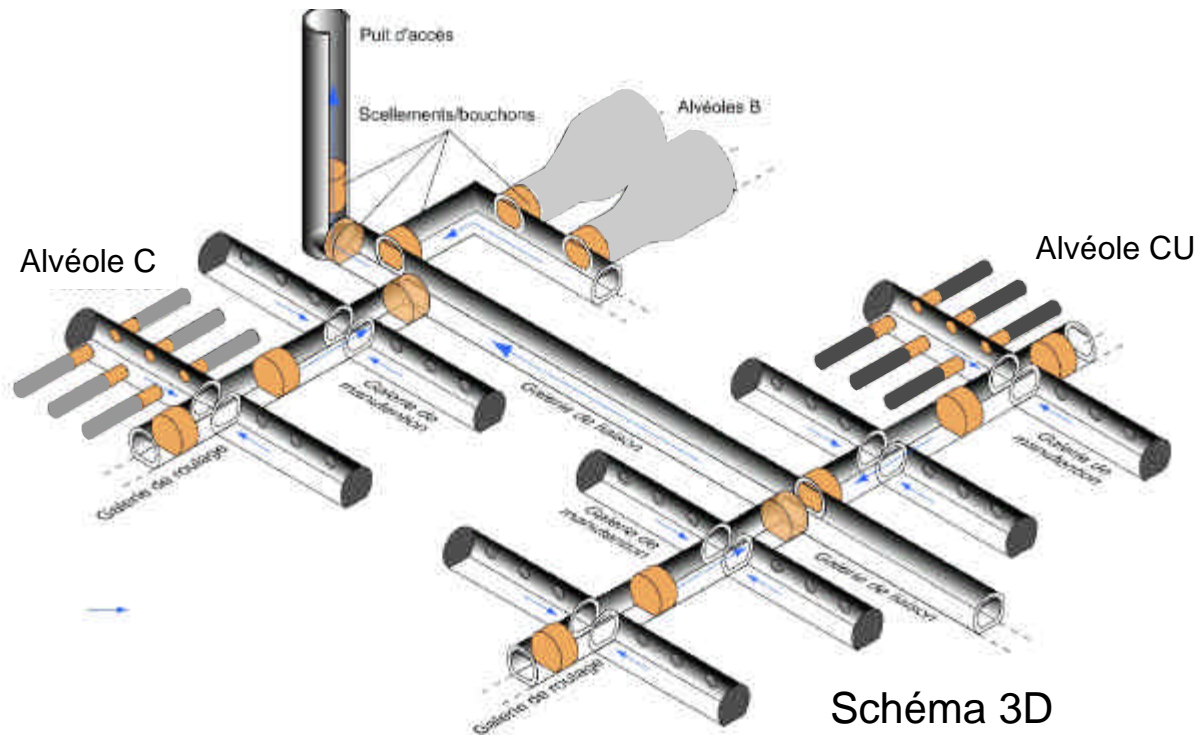
Exemple d'une alvéole de déchets vitrifiés



Contexte (2)

2/ Identification des voies de transfert

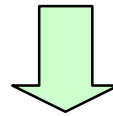
1. Vers les matériaux présentant les perméabilités les plus élevées et les pressions d'entrée de gaz les plus faibles (exemples : remblais de galerie, béton de soutènement...)
2. Vers la couche géologique du fait des grandes surfaces d'échange et un volume de dissolution important



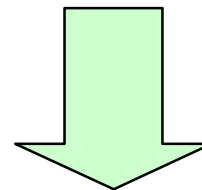
Contexte (3)

3/ Questions auxquelles doit répondre l'Andra

- Quels niveaux de pression de gaz atteints dans les différents compartiments du stockage ?
- Conséquences de surpressions de gaz sur les matériaux de confinement
- Implication des gaz sur l'organisation des écoulements autour des ouvrages
- Etat de saturation des alvéoles de stockages fonction de la production de gaz



Prédictions nécessaires pendant toute la phase de production de gaz (~100 000 ans)



Réalisation de simulations numériques

Principales hypothèses retenues dans les modèles de transfert de gaz

- **Représentation de la migration des gaz par un modèle biphasique**
- Mélange gazeux = Hydrogène + vapeur d'eau
- Migration de l'hydrogène dissous dans l'eau par convection/diffusion
- Migration de l'hydrogène en phase gazeuse
- Prise en compte de la compressibilité des gaz
- Pas de couplage avec une éventuelle évolution des propriétés du fait de la mécanique

- Conservation de la quantité de mouvement pour le gaz et pour le liquide

$$\left\{ \begin{array}{l} V_w = -\frac{k k_r^w (S_w)}{m_w} (\nabla P_w + \mathbf{r}_w g \nabla z) \\ V_g = -\frac{k k_r^g (S_g)}{m_g} (\nabla P_g + \mathbf{r}_g g \nabla z) \end{array} \right.$$

Pression capillaire

$$P_c = P_g - P_w$$

Saturation eau/gaz

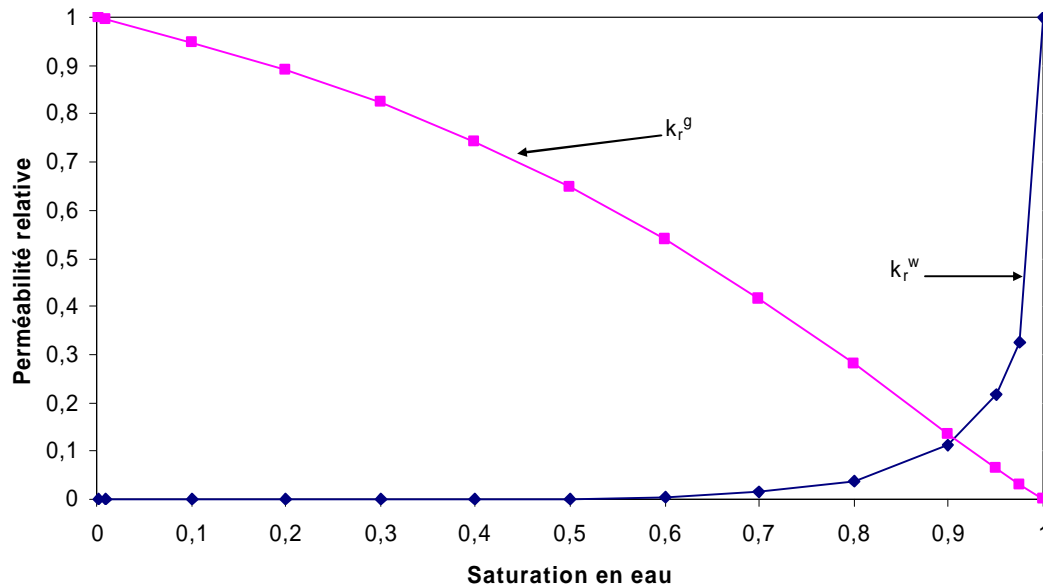
$$S_w = \frac{V_l}{V_p} \quad S_g = \frac{V_g}{V_p}$$

- Conservation de la masse

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\mathbf{r}_w w S_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r}_w V_w) = Q_w \\ \frac{\partial(\mathbf{r}_g w S_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r}_g V_g) = Q_g \end{array} \right.$$

$$S_g + S_w = 1$$

- Perméabilité relative à l'eau (Van Genuchten, 1980) : $K_r^w = \sqrt{S_{we}} \left[1 - \left(1 - S_{we}^{1/m} \right)^m \right]^2$
- Perméabilité au gaz (Parker, 1989 p=2 ; Finsterle, 1999, p=3) : $K_r^g = \left(1 - S_{we} \right)^{1/p} \left[1 - S_{we}^{1/m} \right]^{2m}$



- Rétention capillaire (Van Genuchten, 1980)

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

Saturation effective :

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

- Conservation de la masse pour l'hydrogène gazeux et dissous:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w} S_g \mathbf{r}_g X_{H_2}^g) + \nabla \cdot (\mathbf{r}_g X_{H_2}^g \mathbf{V}_g - \mathbf{J}_{H_2}^g) + \Omega_{H_2}^{g/l} + Q_{H_2}^g = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{w} S_l \mathbf{r}_w X_{H_2}^w) + \nabla \cdot (\mathbf{r}_w X_{H_2}^w \mathbf{V}_w - \mathbf{J}_{H_2}^w) + \Omega_{H_2}^{l/g} + Q_{H_2}^w = 0 \end{array} \right.$$

$$\mathbf{J}_{H_2}^g = \mathbf{r}_g D_{H_2/vap}^g \nabla X_{H_2}^g \quad \mathbf{J}_{H_2}^w = \mathbf{r}_w D_{H_2}^w \nabla X_{H_2}^w \quad \Omega_{H_2}^{l/g} = -\Omega_{H_2}^{g/l}$$

Loi d'Henry

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

Mélange gazeux

$$P_{vap}^g = \frac{\mathbf{r}_{vap}^g}{M_{vap}} RT \quad P_{H_2}^g = \frac{\mathbf{r}_{H_2}^g}{M_{H_2}} RT \quad P_g = P_{H_2}^g + P_{vap}^g$$

$$\mathbf{r}_{H_2}^g = \frac{m_{H_2}^g}{V_g} \quad \mathbf{r}_g = \frac{m^g}{V_g} \quad X_{H_2}^g = \frac{\mathbf{r}_{H_2}^g}{\mathbf{r}_g} \quad X_{H_2}^w = \frac{\mathbf{r}_{H_2}^w}{\mathbf{r}_w}$$

Objectifs et description de Couplex-Gaz

Objectifs

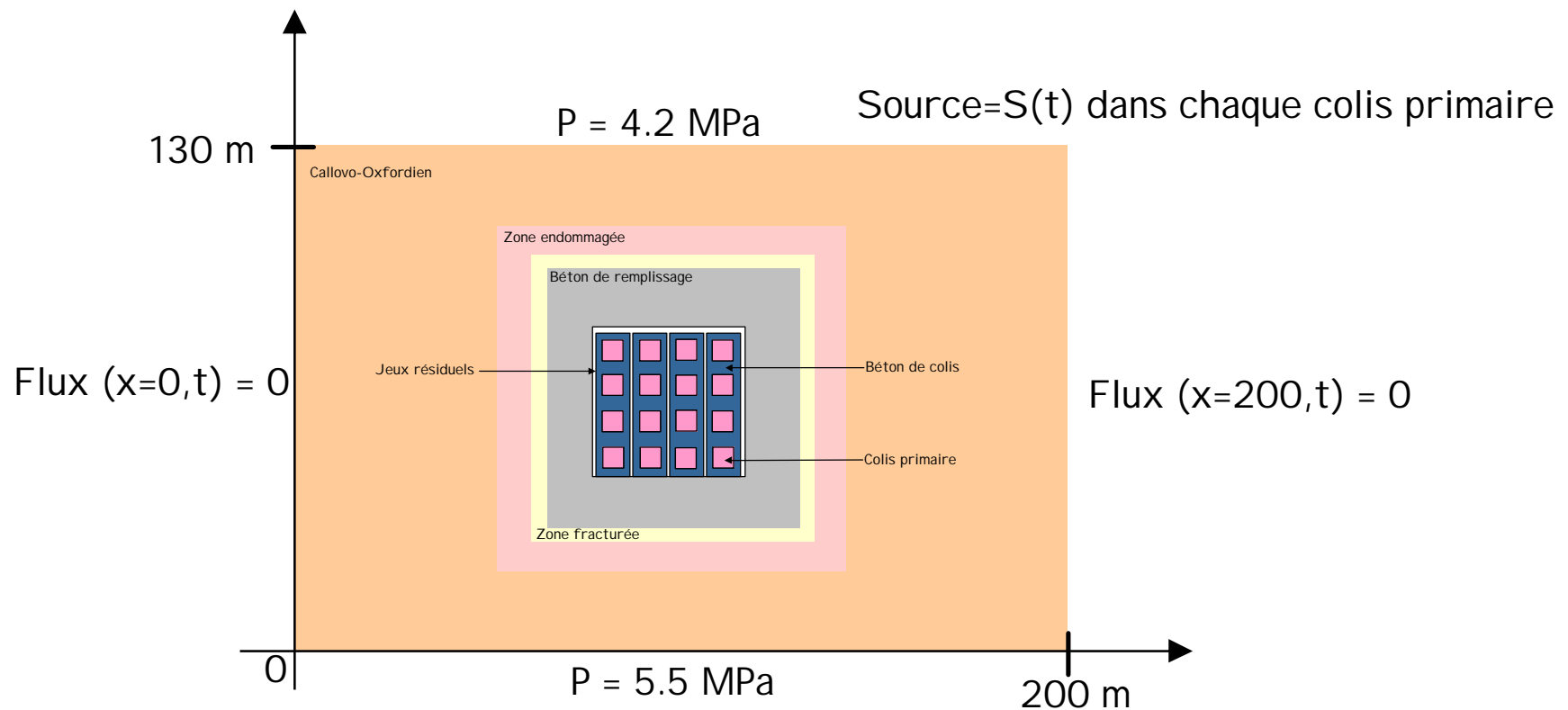
- Identifier les méthodes numériques les plus pertinentes pour la résolution des équations non linéaires associées aux transferts des gaz
- Identifier les points durs numériques associés à ce type de problèmes
- Trouver des solutions pour la modélisation des transferts de gaz à l'échelle du stockage (temps et espace)
- Accroître la confiance dans les outils de calcul pour traiter les transferts de gaz dans le stockage

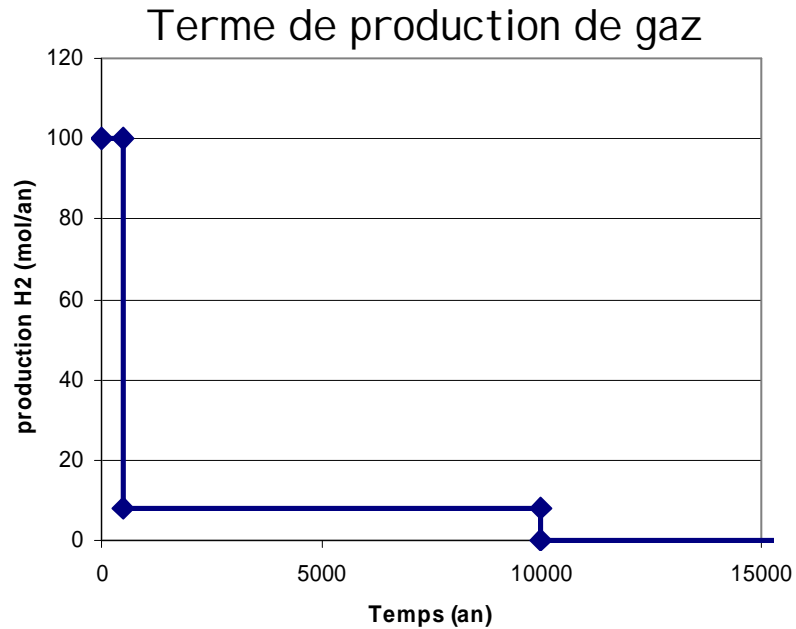
Les principales contraintes induites par la modélisation des gaz dans le stockage :

- des domaines de calcul plurikilométriques,
- des matériaux présentant des perméabilités très faibles (inférieure à 10^{-20} m^2)
- des durées de simulation de plusieurs dizaines de milliers d'années,
- des milieux constitués de matériaux présentant des propriétés très contrastées,
- la représentation d'objets de tailles très différentes (du centimètre au kilomètre),
- des équations pouvant être fortement non linéaires.

Cas test 1 : Transfert de gaz en champ proche, modélisation en 2D d'une alvéole de déchets B**Objectif** : Evaluer la capacité des codes de calcul biphasiques à gérer :

- un milieu comportant des matériaux avec des propriétés très contrastées
- des phénomènes transitoires sur des échelles de temps plurimillénaires
- la disparition de la phase gaz en fin de simulation
- l'avancée du front de désaturation en fonction du temps dans la roche hôte





Matériaux	Perméabilité (m/s)
Colis	10^{-8}
Béton colisage	10^{-12}
Jeu	10^{-8}
Béton soutènement	10^{-11}
Zone fracturée	$5 \cdot 10^{-9}$
Zone endommagée	$5 \cdot 10^{-11}$
Cox	$5 \cdot 10^{-14}$

Durée de simulation = Resaturation totale de l'alvéole

Prédiction :

- position des fronts de saturation et d'hydrogène dissous,
- état de saturation des différents matériaux,
- pressions de gaz et d'eau au cours du temps

2 niveaux de difficultés :

- Cas 1a : Pas de dissolution de l'hydrogène dans l'eau

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\mathbf{r}_w \mathbf{w} S_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r}_w V_w) = Q_w \\ \frac{\partial(\mathbf{r}_g \mathbf{w} S_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{r}_g V_g) = Q_g \end{array} \right.$$

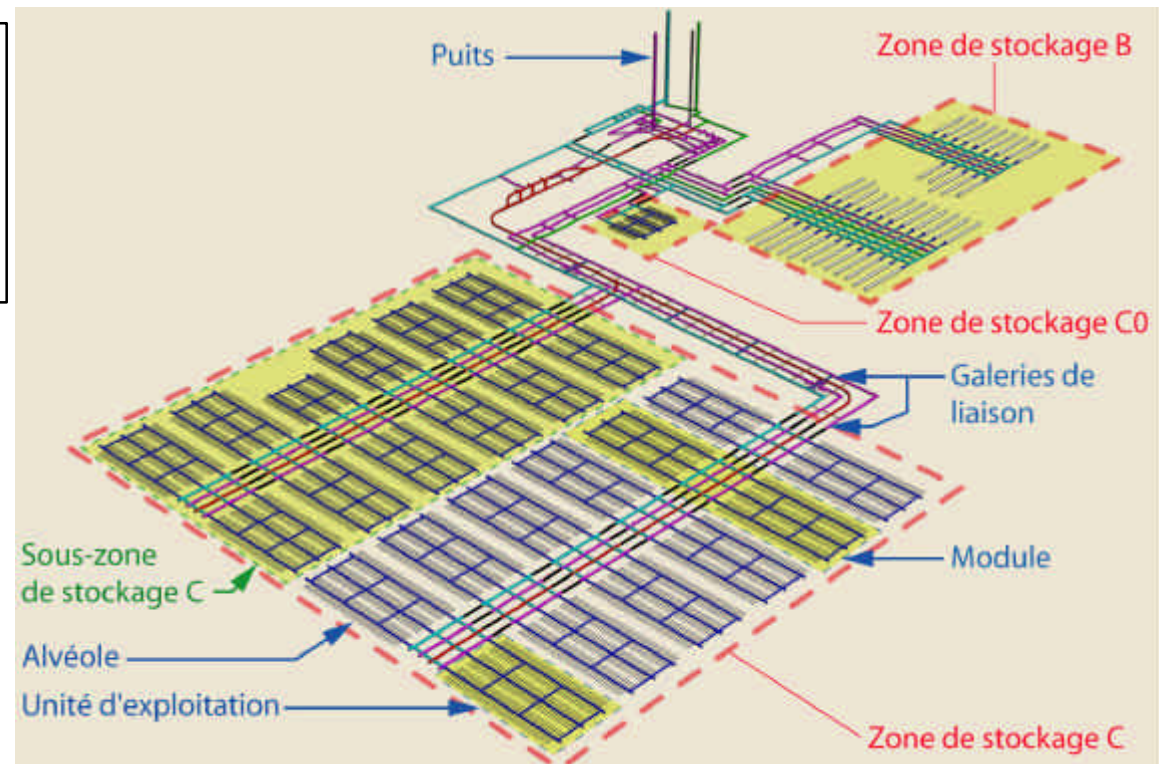
- Cas 1b : Modèle physique complet en prenant en compte les échanges entre les phases liquides et gaz
Prise en compte des lois de mélange dans la phase gazeuse (vapeur d'eau/hydrogène)

Cas test2 : Transfert des gaz le stockage, modélisation d'une zone de stockage de déchets C

Objectif : proposer des solutions pour modéliser une zone 3D comportant plusieurs centaines d'alvéoles
décrire le transfert des gaz à travers le réseau de galeries

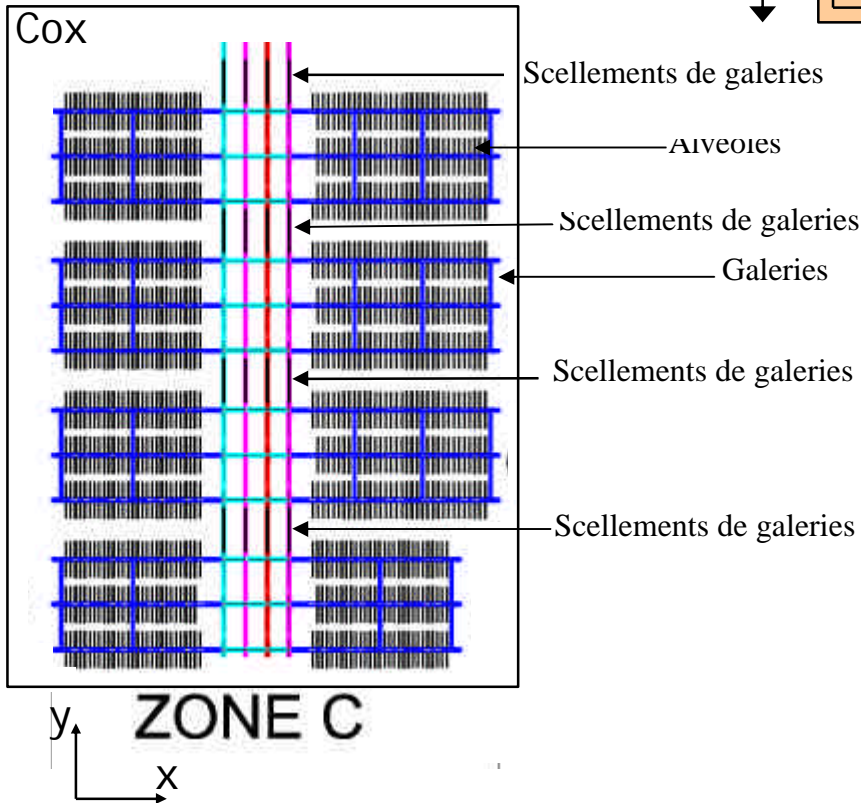
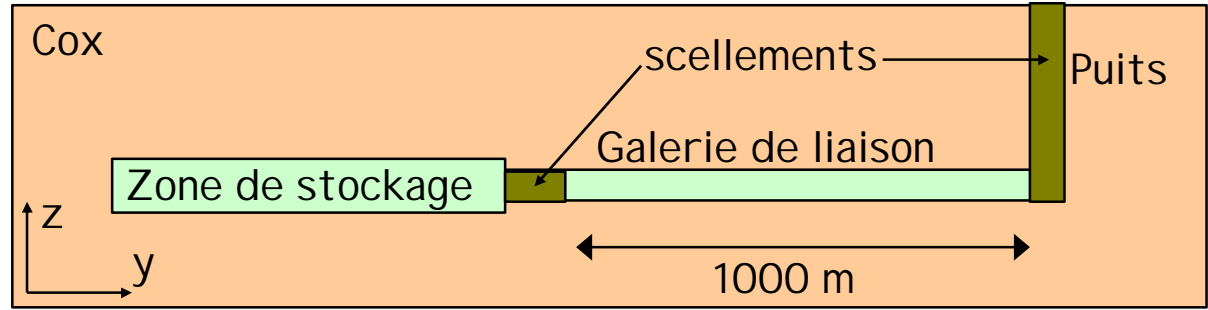
Limite actuelle pour les simulations:

Représentation des transferts de gaz
Depuis l'alvéole dans les galeries et
vers les puits

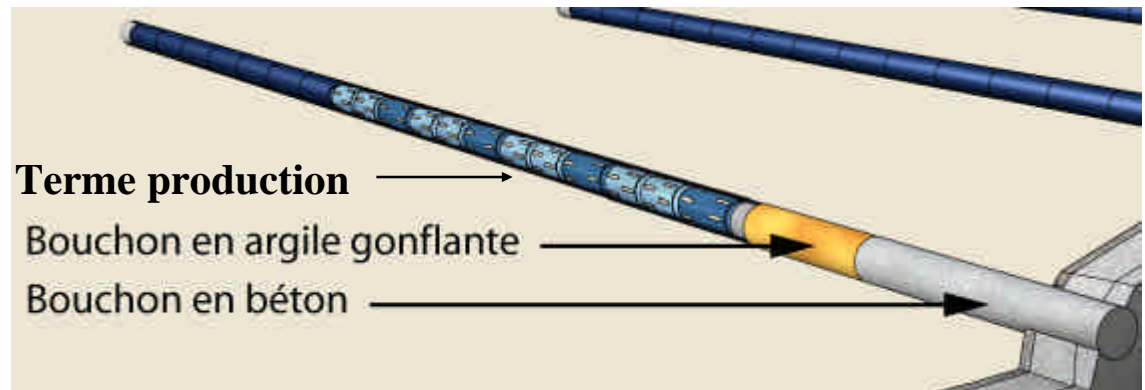


Géométrie cible

130 m

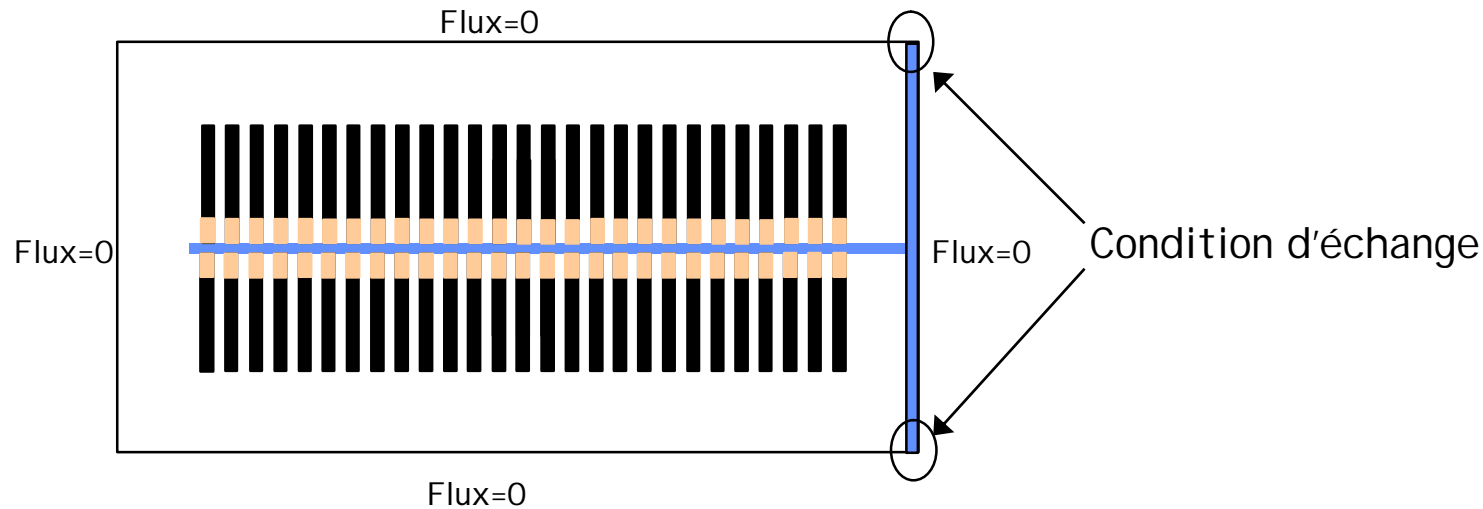


- Une source de gaz fonction du temps par alvéole
- Description du corps et du bouchon d'alvéole
- Diamètre d'alvéole 60 cm



Proposition d'une réalisation en plusieurs étapes :

1/ Géométrie simplifiée



2/ Géométrie équivalente

Traitement d'un problème identique mais en proposant une représentation géométrique simplifiée
Comparaison avec les résultats précédents pour valider l'approche

3/ Géométrie complète

Prédiction

- position des fronts de saturation et d'hydrogène dissous,
 - état de saturation des différents matériaux,
 - pressions de gaz et d'eau au cours du temps,
 - flux de gaz dans les galeries et dans les puits.
-
- Prise en compte pour ce cas d'une physique simplifiée (identique à celle du cas 1a)

Organisation

Publication du benchmark complet : début 2006

Mise à disposition de l'ensemble des données sur le site Web de l'Andra

Mise en place d'un comité scientifique

Planning envisagé : Durée de l'ordre 1an

- Point intermédiaire après 6 mois : présentation des résultats du cas 1 (workshop vers septembre 2006)