

The logo for IRSN, featuring the letters 'IRSN' in a bold, sans-serif font. The 'I' and 'R' are red, while the 'S' and 'N' are blue.

INSTITUT
DE RADIOPROTECTION
ET DE SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Simulation d'écoulement diphasique en
milieu poreux,
modèle sans échanges de masse.

Applications aux cas test *MoMaS*.

Aussal Matthieu - Magdalena Dymitrowska

Le 21 septembre 2010 - Fontenay aux Roses

Plan de l'exposé

I. Modélisation

1. Modèle Mathématique
2. Formulations

II. Discrétisation

1. Principes généraux
2. Discrétisation spatiale
3. Formulation directe
4. Traitement des interfaces en multi-matériaux

III. Validation

IV. Application aux exercices MoMaS

1. MOMAS4
2. MOMAS3
3. MOMAS1b
4. MOMAS2

I. Modélisation

I.1 Modèle Mathématique

■ Lois de conservation de la masse pour chaque phase

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_{\alpha} S_{\alpha}) + \text{div}(\rho_{\alpha} \vec{q}_{\alpha}) = Q_{\alpha}, \quad \alpha = \{w, g\}$$

■ Vitesses de Darcy par phase: $\vec{q}_{\alpha} = -\lambda_{\alpha} \mathbf{K} (\vec{\nabla} P_{\alpha} - \rho_{\alpha} \vec{g})$, $\alpha = \{w, g\}$

■ Pression capillaire: $P_c = P_g - P_w$

■ Équation de fermeture: $S_w + S_g = 1$

■ Loi des gaz parfaits: $PV = nRT \Rightarrow \rho_g = \sigma_g P$

■ Courbes des perméabilités relatives $k_{r,\alpha}(S_{\alpha})$ et pression capillaire $P_c(S_{\alpha})$ données par des modèles analytiques.

➤ Van Genuchten

■ Choix des inconnues

➤ Pression de gaz $P=P_g$

➤ Saturation d'eau $S=S_w$

I.2 Formulations

■ Formulation en débit total:

■ Equation de la saturation

$$\Phi \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} (f_w(S) \vec{q}) + \operatorname{div} (K \nabla \alpha_2(S)) + \operatorname{div} (\rho_g \lambda_g(S) (\rho - \rho_g) K \vec{g}) = \frac{Q_w}{\rho}$$

■ Equation de la pression

$$\Phi \frac{\partial}{\partial t} ((\rho - \rho_g) S + \rho_g) - \operatorname{div} (\lambda(S, P) K \nabla P) + \operatorname{div} (\rho K \nabla \alpha_1(S)) \\ + \operatorname{div} (\lambda_2(S, P) K \vec{g}) = Q_g + Q_w$$

■ Vitesse totale pondérée

$$\vec{q} = -\lambda(S) K \nabla P + \rho K \nabla \alpha_1(S) + \lambda_2(S, P) K \vec{g},$$

$$\vec{q} = \rho_w \vec{q}_w + \rho_g \vec{q}_g$$

➤ Où $\lambda, \lambda_2, \alpha_1, \alpha_2$ sont des fonctions non linéaires de S et P

Système d'équations paraboliques non linéaires, couplées et dégénérées de type convection-diffusion

■ Formulation directe:

■ Equation de la saturation

$$\Phi \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} (\lambda_w(S) K \nabla P) + \operatorname{div} (K \nabla \alpha_1(S)) + \operatorname{div} (\rho \lambda_w(S) K \vec{g}) = \frac{Q_w}{\rho}$$

■ Equation de la pression

$$\Phi \frac{\partial}{\partial t} ((1 - S)P) - \operatorname{div} (P \lambda_g(S) K \nabla P) + \operatorname{div} (\lambda_g(S) \rho_g P K \vec{g}) = \frac{Q_g}{\sigma_g}$$

Où $\lambda_w, \lambda_g, \alpha_1$ sont des fonctions non linéaires de S et P

Systeme d'équations paraboliques non linéaires, couplées et dégénérées de type convection-diffusion.

II. Discrétisation

II.1 Principes généraux

- Géométrie 2D - Triangles
- Schéma centré sur les nœuds ou « vertex-centered »
- Discrétisation implicite en temps, aucune CFL mais diffusion numérique
- Discrétisation spatiale:
 - Type Volumes Finis décentrés amont pour la convection => Système non linéaire
 - Type Éléments Finis P1 pour la diffusion => Système linéaire
- Résolution fully-implicite du système linéaire par librairie Laspack
- Evaluation par point fixe des fonctions non linéaires
- Implémentation en langage C

II.2 Discrétisation spatiale

■ Opérateur de convection: Volumes finis décentrés amont

$$\mathfrak{C}(X^{n+1}) = \text{div} (F_t(X^{n+1})\vec{q})$$

➤ Application du théorème de Green Ostrogradsky

$$\int_{M_j} \mathfrak{C}(X^{n+1}) dv = \int_{\partial M_j} F_t(X^{n+1})\vec{q} \cdot \vec{n} ds$$

➤ Discrétisation amont du flux

$$\sum_{\substack{l \in N(j) \\ a \in \{1,2\}}} \left[F_t(X_j^{n+1})(\vec{q}_{jl} \cdot \vec{n}_{jl}^a)^+ + F_t(X_l^{n+1})(\vec{q}_{jl} \cdot \vec{n}_{jl}^a)^- \right] |s_{jl}^a|$$

avec les opérateurs $u^+ = \max(u, 0)$ et $u^- = \min(u, 0)$

■ Opérateur de diffusion: Éléments finis P1

$$\mathfrak{D}(X^{n+1}) = \operatorname{div} (K \nabla \alpha(X^{n+1})) \quad \text{avec} \quad \alpha(X^{n+1}) = \int_a^X F_d(x) dx$$

➤ Théorème de Green Ostrogradski

$$\int_{M_j} \mathfrak{D}(X^{n+1}) dv = \int_{\partial M_j} K \nabla \alpha(X^{n+1}) \cdot \vec{n} ds$$

➤ Projection des gradients sur la base nodale

$$\sum_{\substack{l \in N^*(j) \\ a \in \{1,2\}}} F_d^e \cdot (X_l^n - X_j^n) D_{jl}^a$$

$$\text{avec} \quad D_{jl}^a = -|\mathcal{T}_{jl}^a| \nabla N_{l, \mathcal{T}_{jl}^a} K_{\mathcal{T}_{jl}^a} \cdot \nabla N_{j, \mathcal{T}_{jl}^a}$$

$$\text{et} \quad \nabla N_{j, \mathcal{T}_{jl}^a} := -\frac{|L_{kl}|}{2|\mathcal{T}_{jl}^a|} \vec{n}_{\mathcal{T}_{kl}^a, L_{kl}}$$

II.3 Formulation directe

■ Equation de saturation

$$\begin{aligned}
 & S_j^{n+1} |M_j| \Phi_j - \Delta t^n \sum_{\substack{l \in N^*(j) \\ a \in \{1,2\}}} F_{d,1}(S^{n+1})(P_l^{n+1} - P_j^{n+1}) D_{jl}^a \\
 & + \Delta t^n \sum_{\substack{l \in N^*(j) \\ a \in \{1,2\}}} F_{d,2}(S^{n+1})(S_l^{n+1} - S_j^{n+1}) D_{jl}^a \\
 & + \Delta t \sum_{\substack{l \in N(j) \\ a \in \{1,2\}}} [F_t(S_j^{n+1})(K_{jl}^a \vec{g} \cdot \vec{n}_{jl}^a)^+ + F_t(S_l^{n+1})(K_{jl}^a \vec{g} \cdot \vec{N}_l)^-] |s_{jl}^a| \\
 & = S_j^n |M_j| \Phi_j + \Delta t^n \frac{Q_{wj}^{n+1}}{\rho} |M_j|
 \end{aligned}$$

Avec:

$$F_{d,1}(S^{n+1}) = \lambda_w(S^{n+1}),$$

$$F_{d,2}(S^{n+1}) = \lambda_w(S^{n+1}) P_c'(S^{n+1})$$

$$F(S_j^{n+1}) = \rho \lambda_w(S_j^{n+1})$$

■ Equation de pression

$$\begin{aligned}
 & [-(1 - S_j^{n+1})P_j^n + (1 - 2S_j^{n+1} + S_j^n)P_j^{n+1}] |M_j| \Phi_j \\
 & - \Delta t^n \sum_{\substack{l \in N^*(j) \\ a \in \{1,2\}}} G_{d,1}(S^{n+1}, P^{n+1})(P_l^{n+1} - P_j^{n+1}) D_{jl}^a \\
 & + \Delta t \sum_{\substack{l \in N(j) \\ a \in \{1,2\}}} [G_t(S_j^{n+1}, P_j^{n+1})(K_{jl}^a \vec{g} \cdot \vec{n}_{jl})^+ \\
 & + G_t(S_l^{n+1}, P_l^{n+1})(K_{jl}^a \vec{g} \cdot \vec{N}_l)^-] |s_{jl}^a| \\
 & = \Delta t^n \frac{Q_{gj}^{n+1}}{\sigma_g} |M_j|
 \end{aligned}$$

Avec:

$$\begin{aligned}
 G_{d,1}(S^{n+1}, P^{n+1}) &= P^{n+1} \lambda_g(S^{n+1}), \\
 G_t(S_j^{n+1}, P_j^{n+1}) &= \sigma_g (P_j^{n+1})^2 \lambda_g(S_j^{n+1})
 \end{aligned}$$

II.4 Traitement aux interfaces en multimatériaux

- Pression de gaz P **continue**
- Pression capillaire P_c **continue**
- Saturation d'eau S **discontinue**

➤ Idée: Evaluation de la saturation d'eau en utilisant la pression capillaire des n éléments T_k adjacents au volume de contrôle M_j

Saturation moyenne aux interfaces

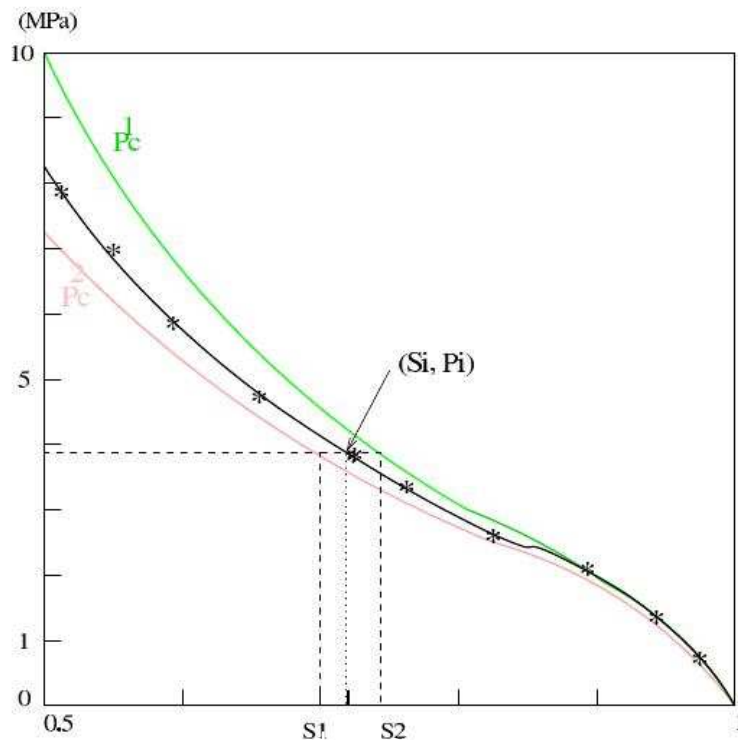
$$|M_j| \Phi_j S_j = \sum_{T_k} \frac{1}{3} |T_k| \Phi_{T_k} S_j^{T_k}$$

Continuité de la pression capillaire

$$p_{c,j} = P_c^{T_1}(S_j^{T_1}) = \dots = P_c^{T_n}(S_j^{T_n})$$

Saut de la saturation

$$S_j^{T_k} = (P_c^{T_k})^{-1}(p_{c,j})$$



III. Validation

Validation analytique

■ Principe

- Supposer des solutions en saturation/pression connues. Par exemple:

$$S_w(x, y, t) = 0.05 + 0.94 * y^2 * exp(\alpha t - 1)$$

$$P_g(x, y, t) = P_{scale} * (1 - 0.1 \sin(\pi * y * \alpha t))$$

Avec $\alpha = 10^{-6}$, $P_{scale} = 10^6$ judicieusement choisis

- Formuler le système d'équation avec ces solutions
- Implémenter chaque terme en tant que source
- Décision:

Si (Solutions du code == Solutions analytique)

➤ VALIDATION

Sinon

➤ ECHEC

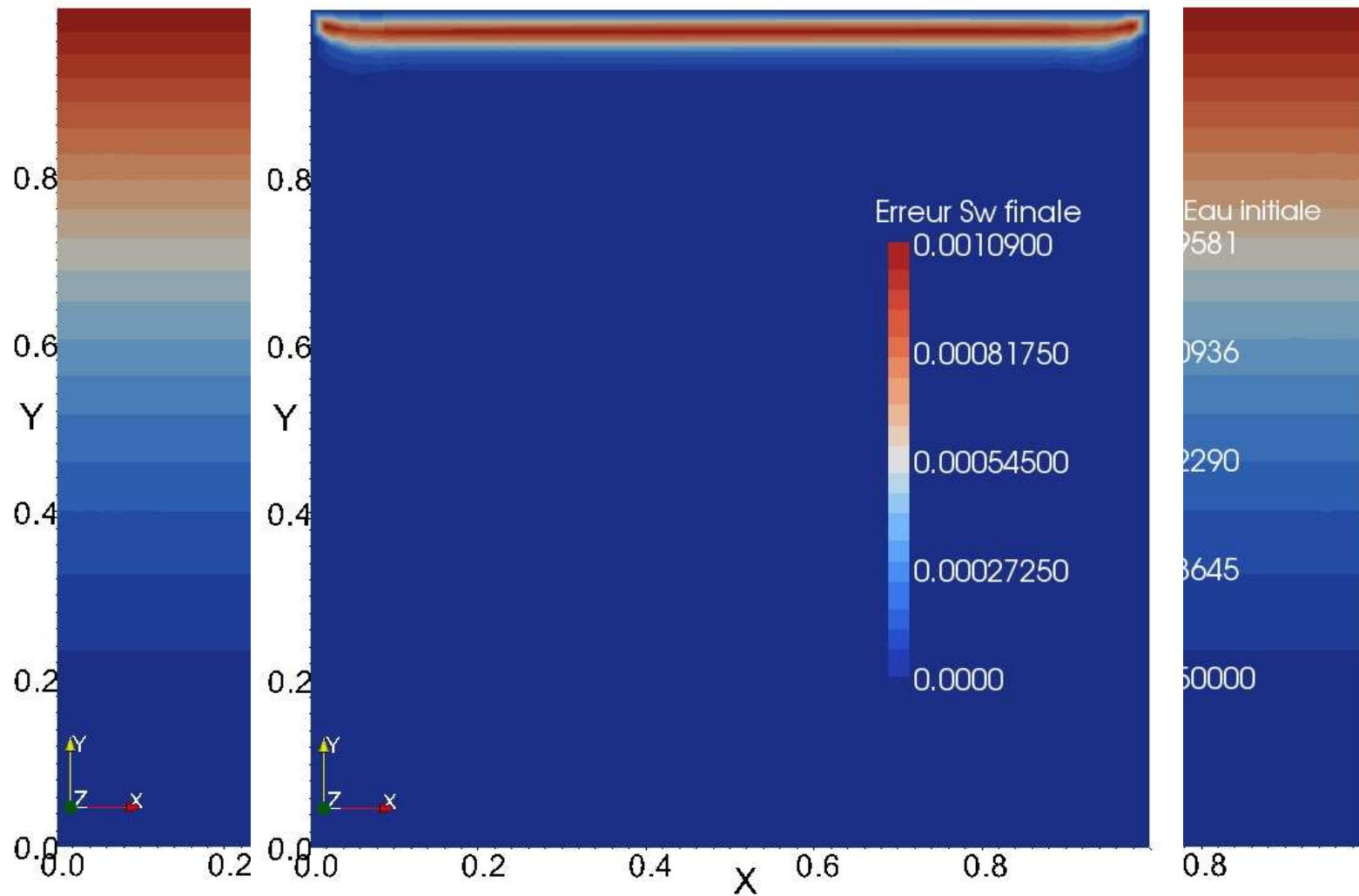
Conditions initiales / conditions aux limites, paramètres:

- Problème type Dirichlet non homogène en temps et espace sur un carré de coté 1m.
- Pas de temps 10^4 secondes, temps final = 10^6 secondes
- Précision solveur linéaire: 10^{-14}
- Précision point fixe: 10^{-5}
- Pas de pesanteur
- Erreur relative:

$$Erreur(X_j) = \frac{|U_{theor}(X_j) - U_{simul}(X_j)|}{|U_{theor}(X_j)|}$$

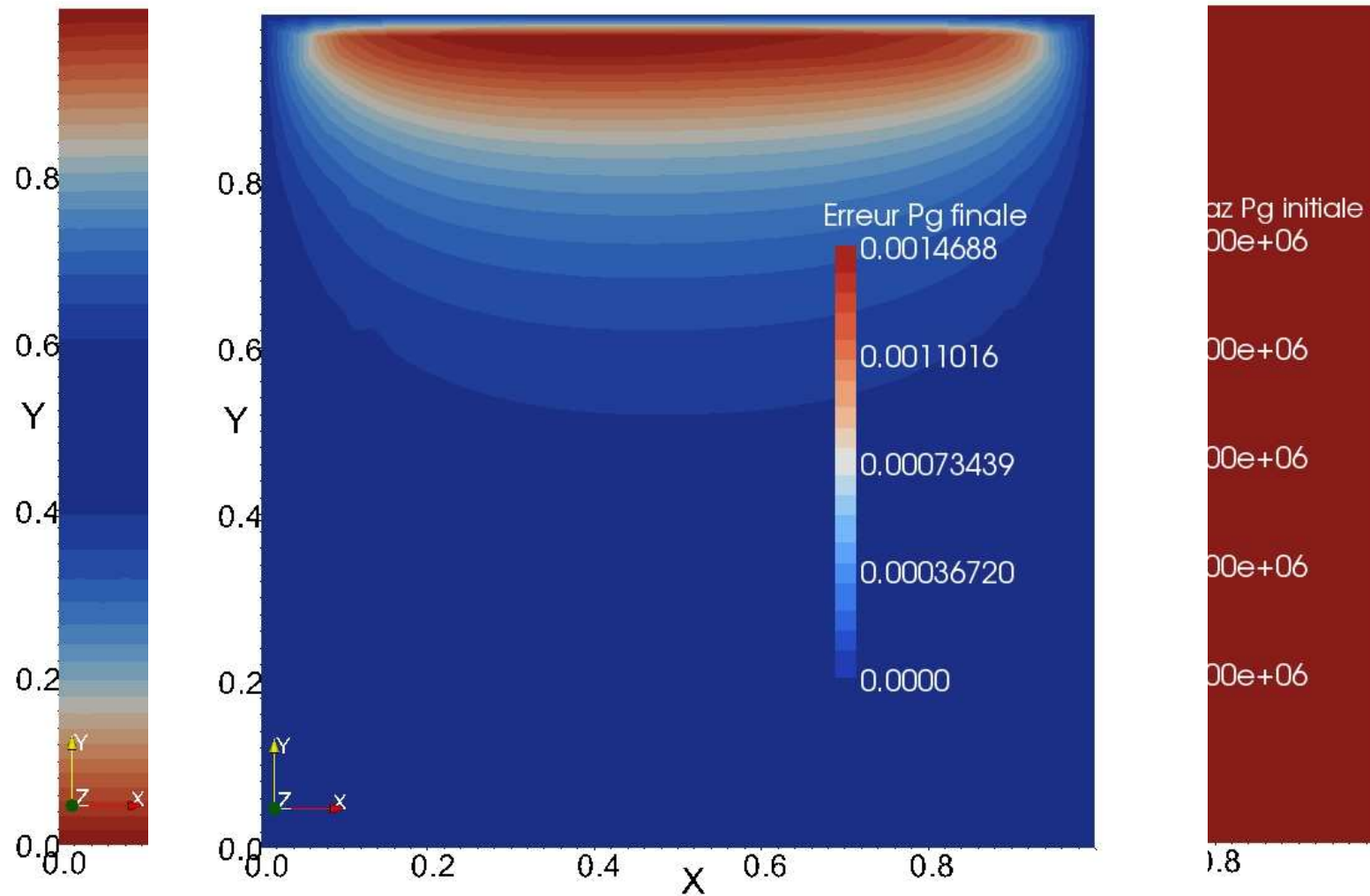
Résultats - Saturation

$$S_w(x, y, t) = 0.05 + 0.94 * y^2 * \exp(\alpha t - 1)$$



Résultats - Pression

$$P_g(x, y, t) = P_{scale} * (1 - 0.1 \sin(\pi * y * \alpha t))$$



IV. Applications

MOMAS

MOMAS4 - BO-BG

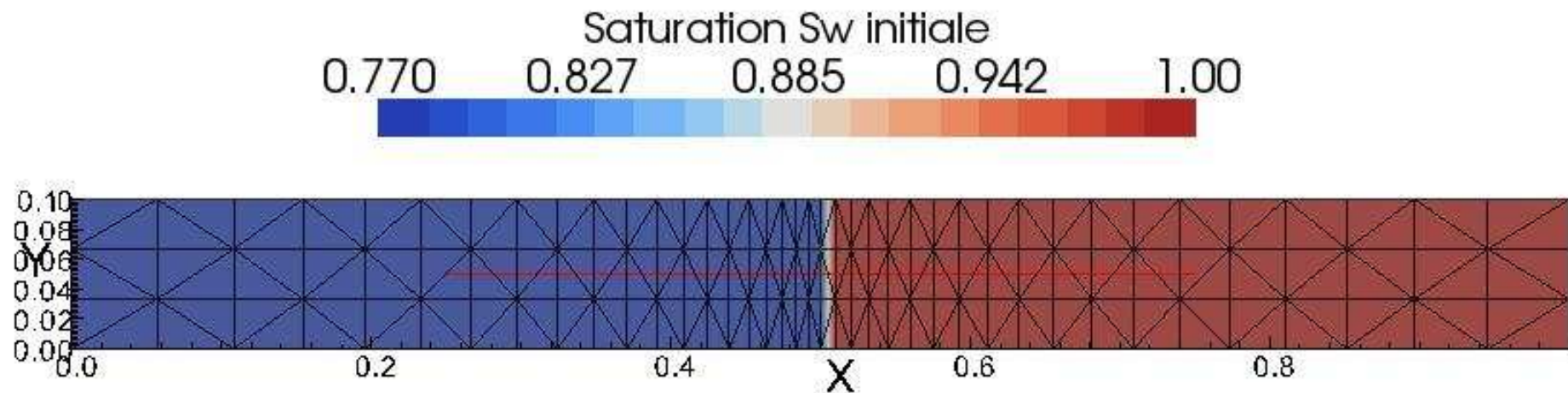
- **Ecoulement diphasique en milieu poreux déformable, sans changement de phase ni dissolution.**
- **Domaine Ω en géométrie 2D: 2 matériaux distincts**
 - $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 = ([0,0.5] \cup [0.5,1]) \times [0,0.1]$
- **Conditions initiales: Hors équilibre**
 - Pression gaz constante = 10^5 Pa sur Ω
 - Saturation d'eau
 - 0.77 sur Ω_1
 - 1.0 sur Ω_2
- **Conditions bords: Flux nul sur toute la frontière de Ω**
- **Temps de simulation : $T_{\max} = 10^5$ s**

MOMAS4 - Paramètres

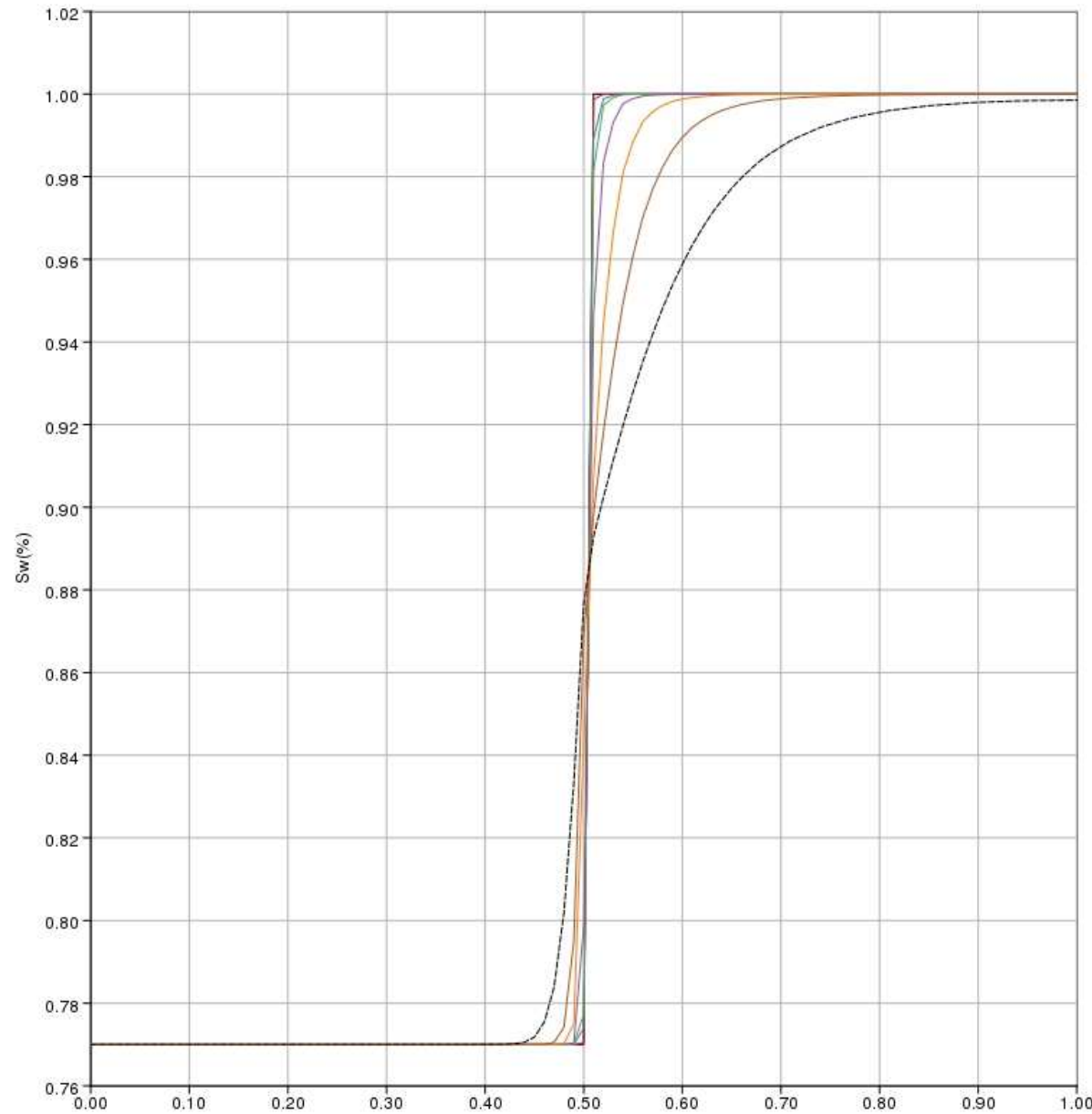
Viscosité du liquide	10^{-3}
Viscosité du gaz	$1.8 * 10^{-5}$
Masse volumique du liquide	1000
Masse molaire du gaz	0,02896

0.5 > x	
Porosité initiale	0.05
Coefficient de déformabilité α	10^{-11}
Perméabilité intrinsèque	10^{-19}
Courbe de sorption	$S_l(P_c) = \left(1 + \left(\frac{P_c}{A} \right)^{\frac{1}{1-B}} \right)^{-B}$ $A = 10 * 10^6$ $B = 0.412$
Perméabilité relative au liquide	$k_l^{rel}(S_l) = \left(1 + (S_l^{-2.429} - 1)^{1.1760} \right)^{-1}$
Perméabilité relative au gaz	$k_g^{rel}(S_l) = (1 - S_l)^2 \left(1 - S_l^{\frac{5}{3}} \right)$

MOMAS4 - Maillage et saturation initiale



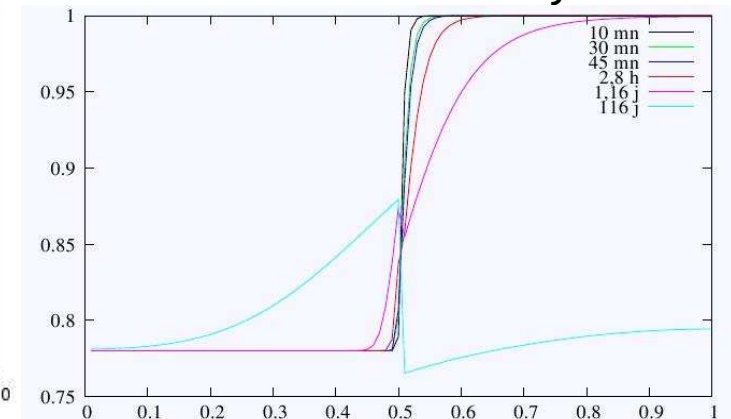
Saturation d'eau S_w au cours du temps sur [0,1]

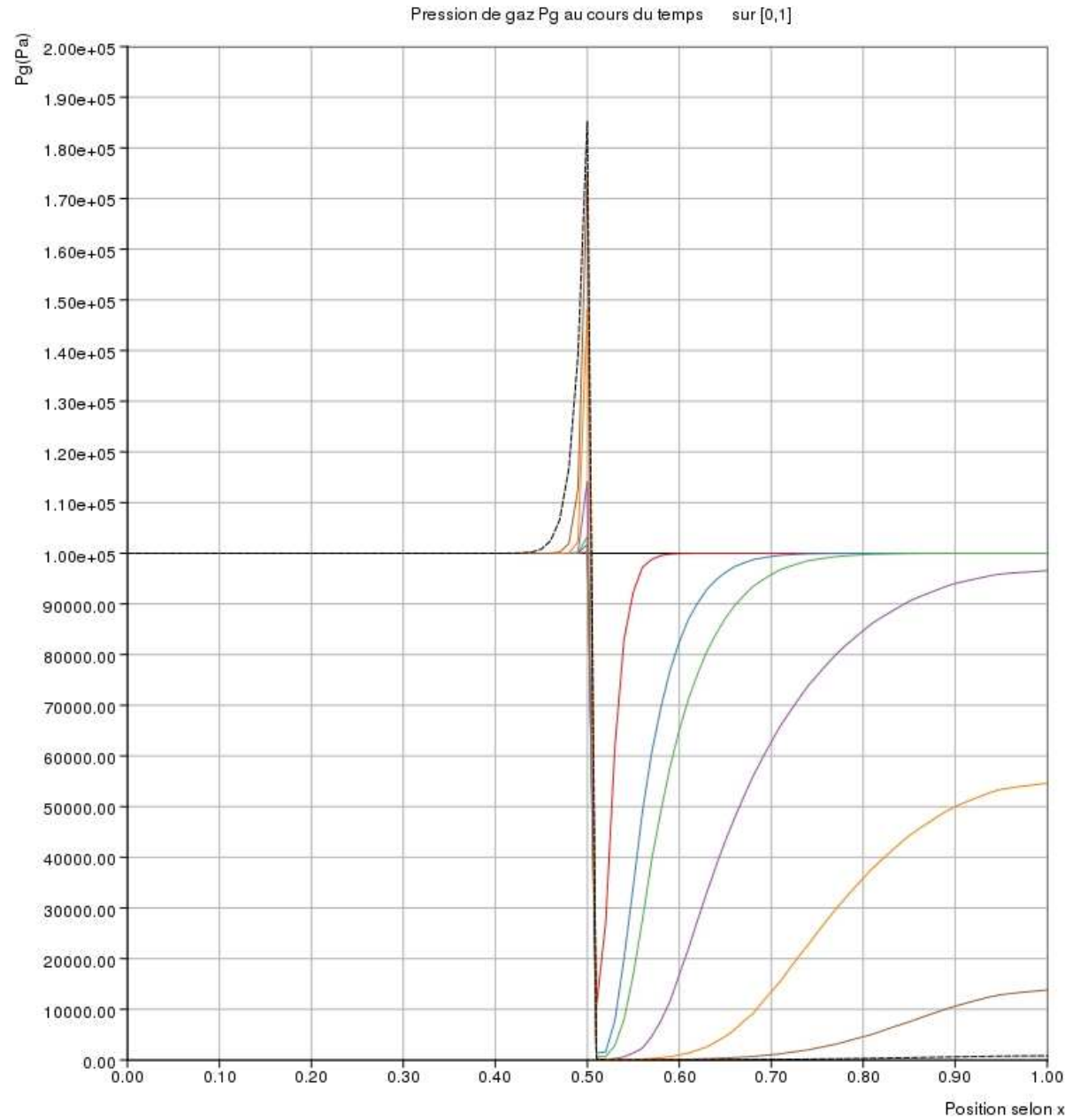


MOMAS4 Saturation d'eau

- / $t=0.0$
- / $t=10s$
- / $t=100s$
- / $t=3.33mn$
- / $t=16.6mn$
- / $t=83.3mn$
- / $t=5.55h$
- / $t=1.16j$

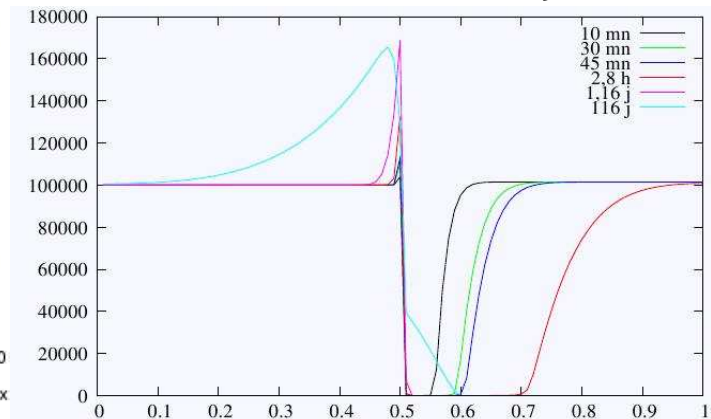
Résultats de R. Eymard



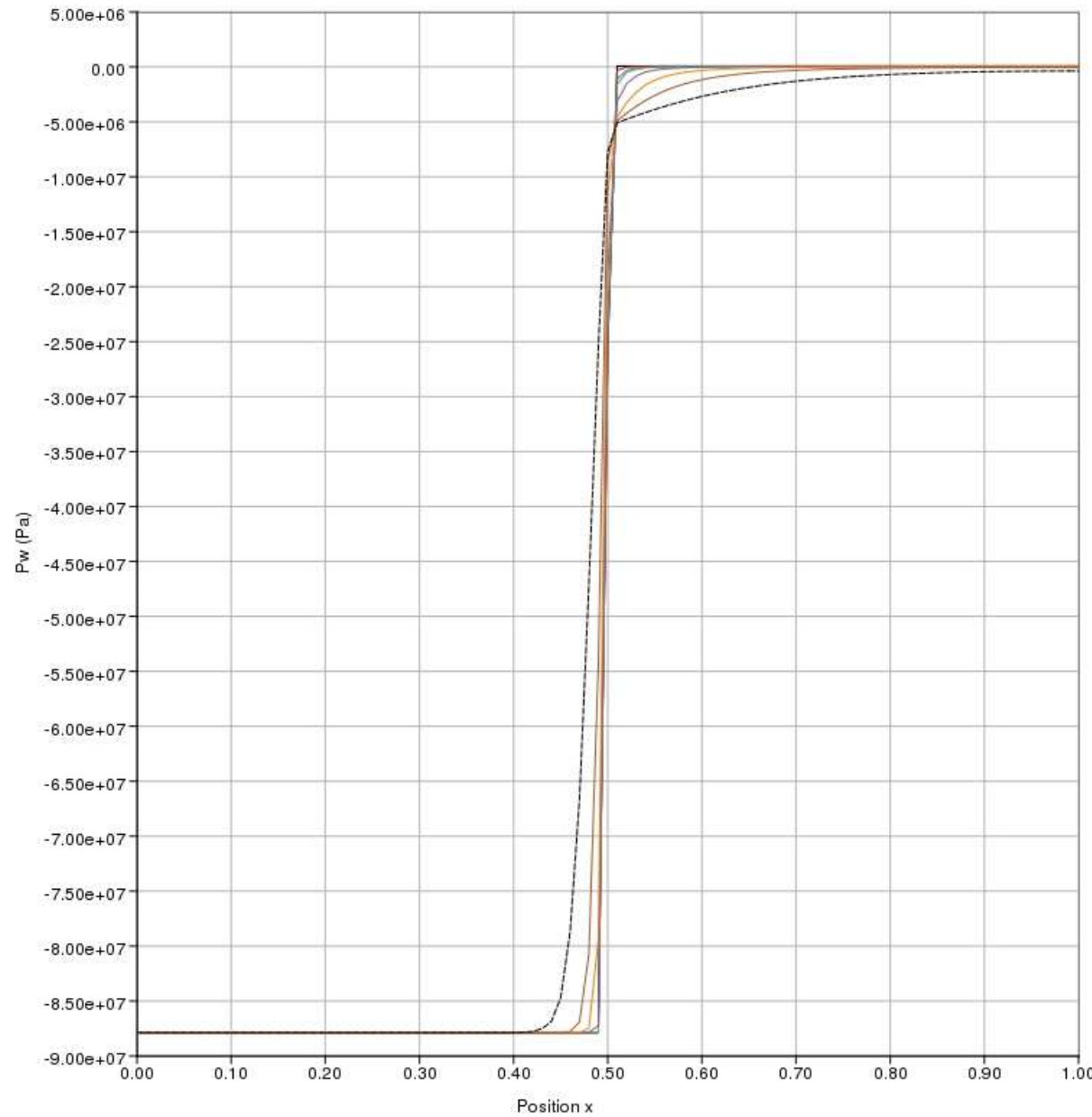


MOMAS4 Pression de gaz

Résultats de R. Eymard



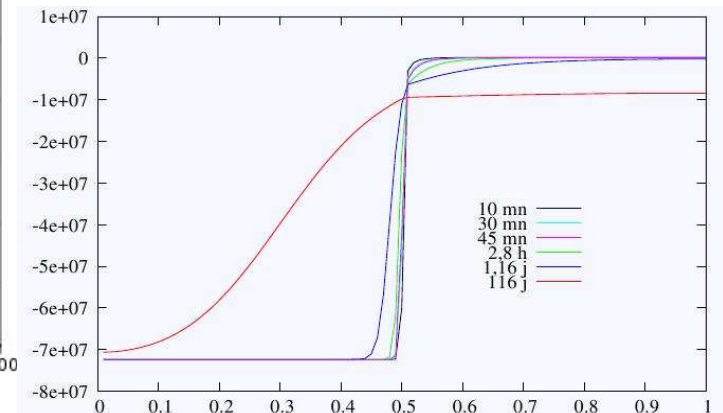
Pression de l'eau Pw au cours du temps sur [0,1]



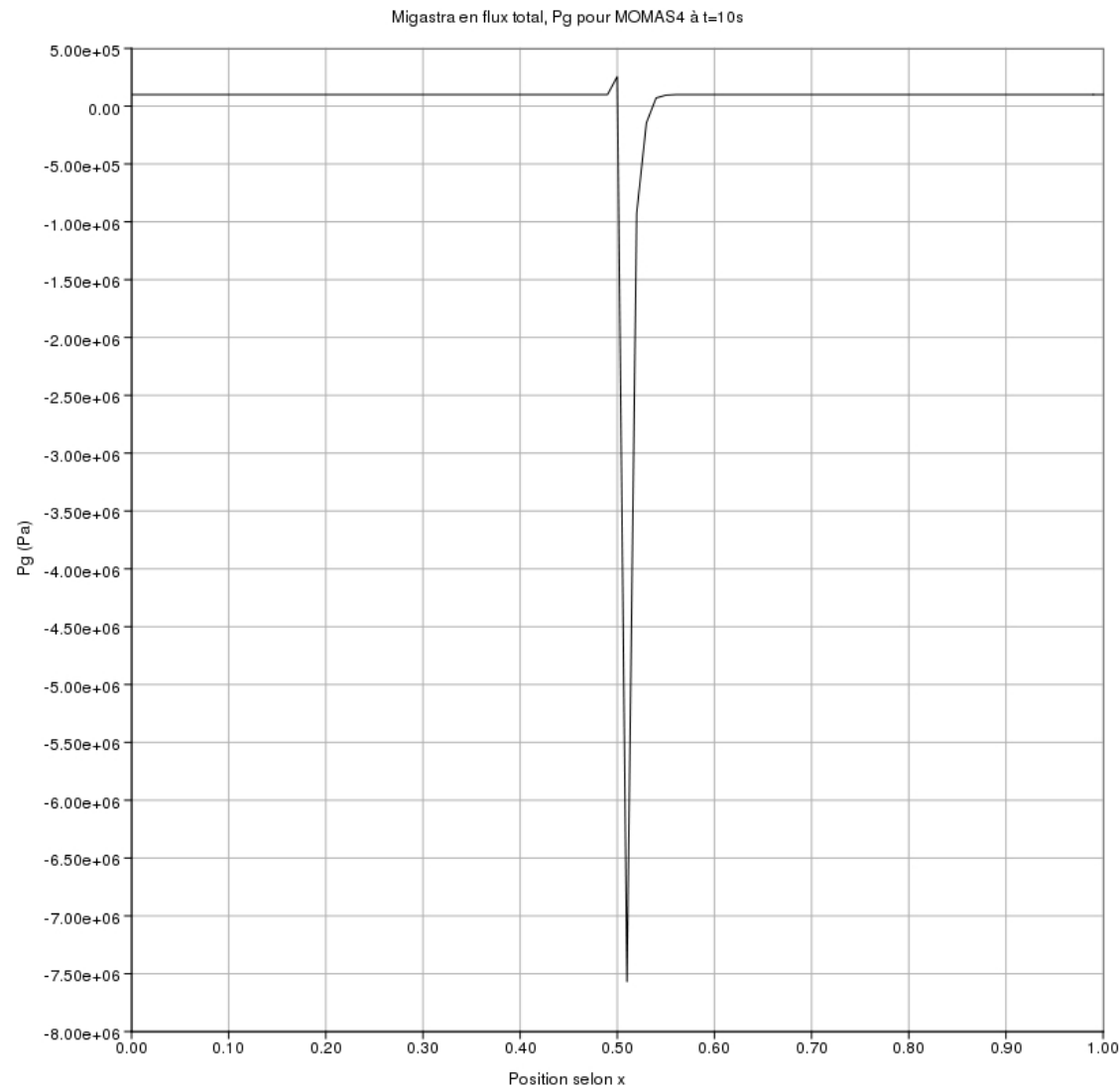
MOMAS4 Pression de l'eau

- t=0.0
- t=10s
- t=100s
- t=3.33mn
- t=16.6mn
- t=83.3mn
- t=5.55h
- t=1.16j

Résultats de R. Eymard



MOMAS4 - Utilisation de la formulation flux total



Configuration identique

=> Apparition de pressions négatives à l'interface dès les premiers instants de temps

MOMAS3

- **Ecoulement diphasique en milieu poreux, avec échanges entre phases (Non modélisé dans Migastra)**
- **Domaine Ω en géométrie 2D: 2 matériaux distincts**
 - $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 = ([0,0.5] \cup [0.5,1]) \times [0,0.1]$
- **Conditions initiales: Hors équilibre**
 - Pression gaz
 - $1.5 \cdot 10^6$ Pa sur Ω_1
 - $2.5 \cdot 10^6$ Pa sur Ω_2
 - Pression de liquide = 10^6 sur Ω
- **Conditions bords: Flux nul sur toute la frontière de Ω**
- **Temps de simulation : $T_{\max} = 10^6$ s**

MOMAS3 - Paramètres

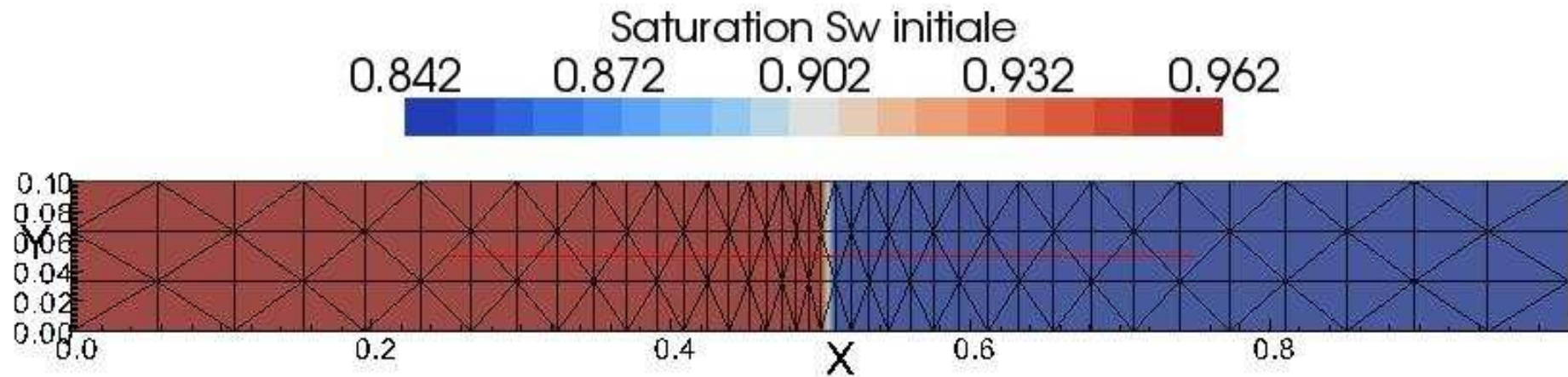
Milieu poreux			Caractéristiques des fluides		
Paramètre	Valeur		Paramètre	Valeur	
k	10^{-16}	m^2	D_l^h	$3 \cdot 10^{-9}$	m^2/s
Φ	0.3	(—)	μ_l	$1 \cdot 10^{-3}$	$Pa.s$
P_r	$2 \cdot 10^6$	Pa	μ_g	$9 \cdot 10^{-6}$	$Pa.s$
n	1.54	(—)	$H(T = 303K)$	$7.65 \cdot 10^{-6}$	$mol/Pa/m^3$
S_{lr}	0.01	(—)	M_l	10^{-2}	kg/mol
S_{gr}	0	(—)	M_g	$2 \cdot 10^{-3}$	kg/mol
			ρ_l^{std}	10^3	kg/m^3
			ρ_g^{std}	$8 \cdot 10^{-2}$	kg/m^3

■ Pression capillaire et perméabilités relative: Modèle de Van Genuchten

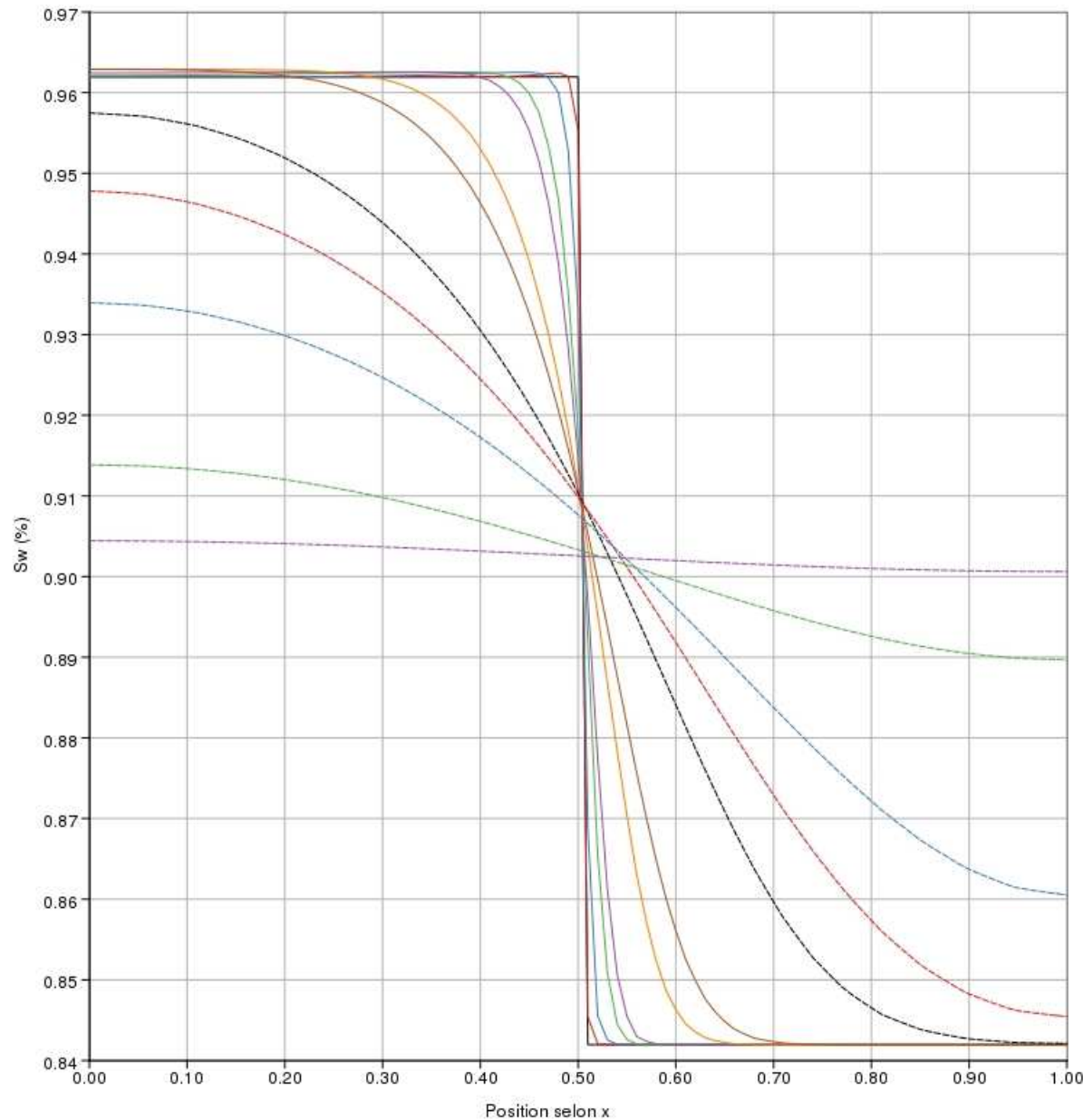
$$p_c = P_r \left(S_{le}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n}, \quad kr_l = \sqrt{S_{le}} \left(1 - \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^m \right)^2 \quad \text{et} \quad kr_g = \sqrt{1 - S_{le}} \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^{2m}$$

$$\text{avec} \quad S_{le} = \frac{S_l - S_{lr}}{1 - S_{lr} - S_{gr}} \quad \text{et} \quad m = 1 - \frac{1}{n}$$

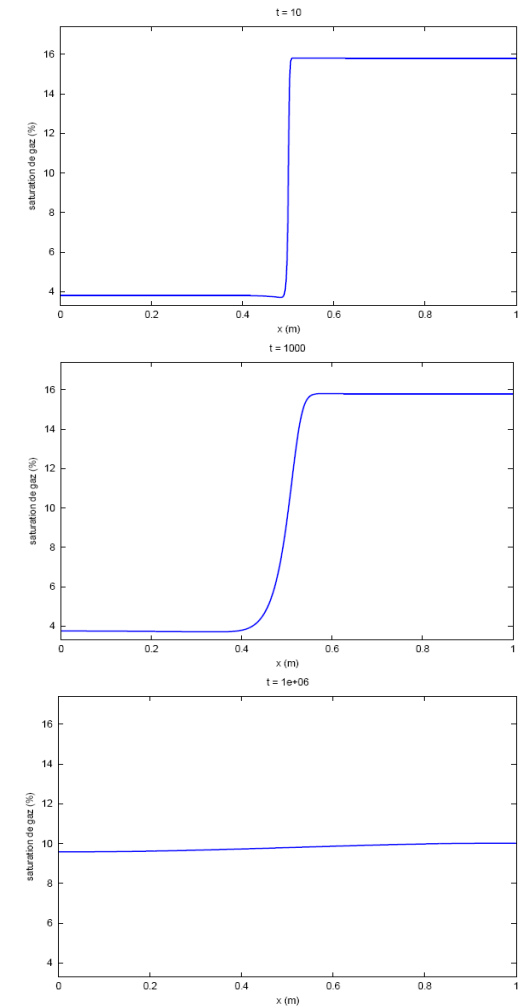
MOMAS3 - Maillage et saturation initiale



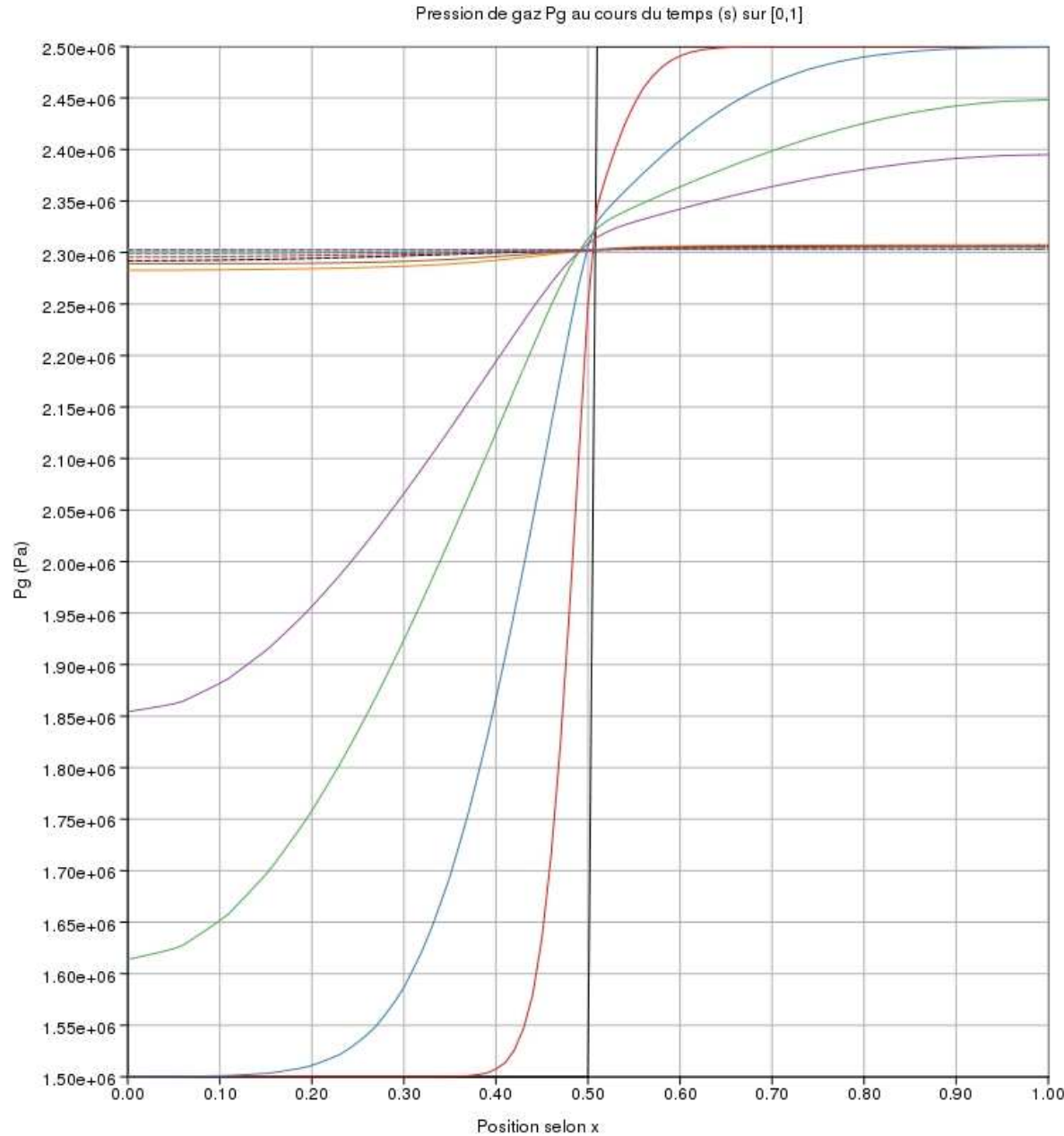
Saturation d'eau S_w au cours du temps (s) sur [0,1]



MOMAS3 Saturation d'eau

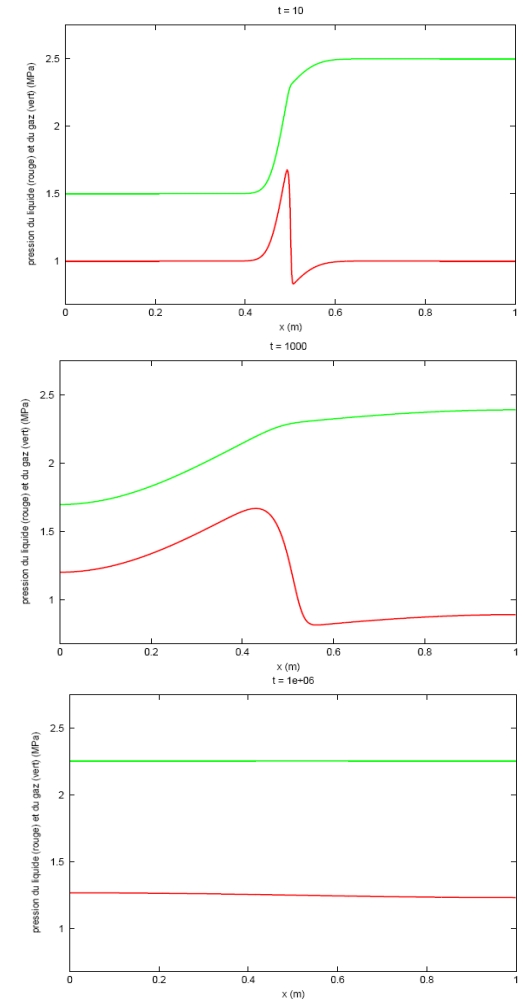


Saturation de gaz, F. Smaï
t=10, 1.000, 1.000.000 s



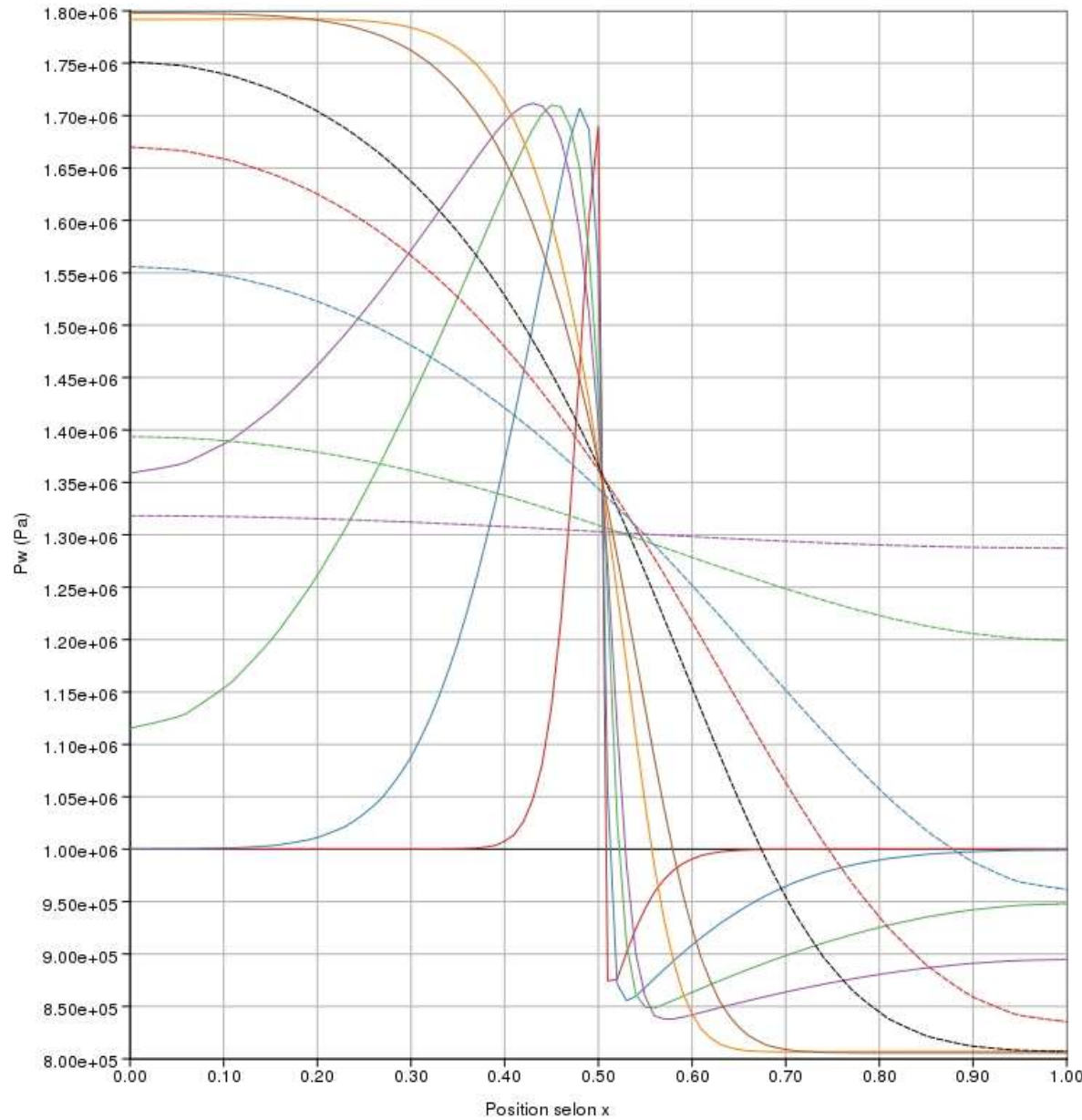
MOMAS3

Pression de gaz

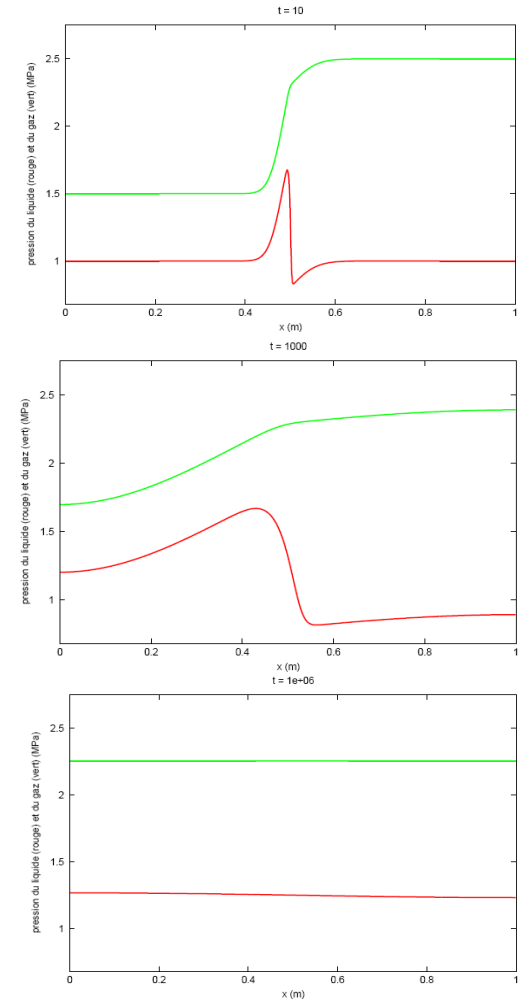


Pression de gaz (vert), F. Smaï
 $t=10, 1.000, 1.000.000$ s

Pression de l'eau P_w au cours du temps (s) sur [0,1]



MOMAS3 Pression de l'eau



Pression de l'eau (rouge), F. Smaï
t=10, 1.000, 1.000.000 s

MOMAS1b

■ **Domaine Ω en géométrie 2D: 1 matériau**

➤ $\Omega = [0,200] \times [0,20]$

■ **Conditions initiales: Hors équilibre**

➤ Pression gaz = $1.1 \cdot 10^6$ Pa sur Ω

➤ Pression de liquide = 10^6 sur Ω

■ **Conditions bords:**

➤ Flux nul sur toute la frontière de Ω extérieur

➤ Injection d'hydrogène à gauche (in) => Flux d'hydrogène

➤ Condition de Dirichlet à droite (out)

■ **Temps de simulation : $T_{\max} = 2 \cdot 10^5$ ans**

■ **Echanges entre phases non modélisés dans Migastra**

MOMAS1b - Paramètres

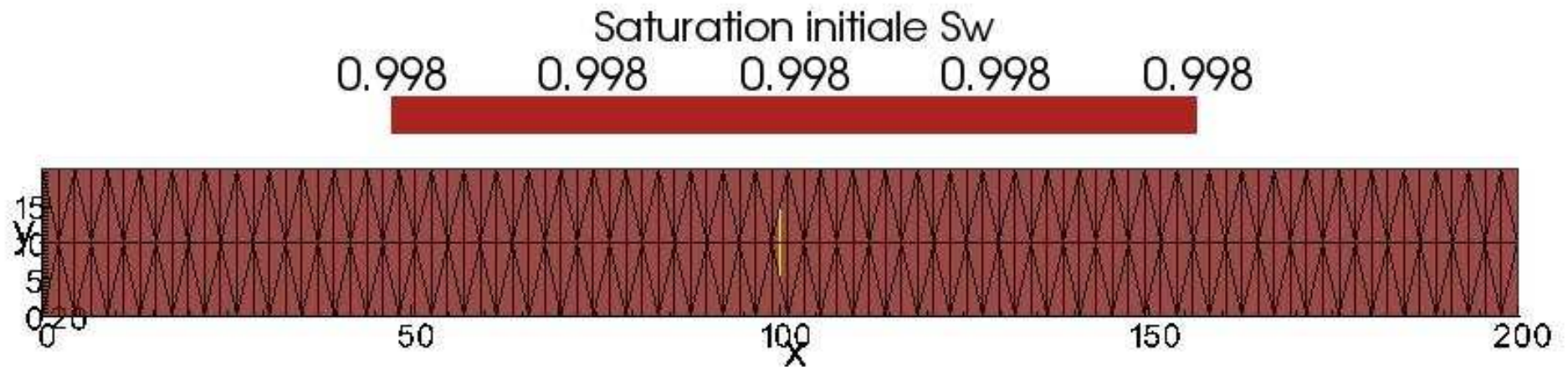
Milieu poreux		Caractéristiques des fluides	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
k	$5 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$	D_l^h	$3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Φ	0.15 (—)	μ_l	$1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$
P_r	$2 \cdot 10^6 \text{ Pa}$	μ_g	$9 \cdot 10^{-6} \text{ Pa}\cdot\text{s}$
n	1.49 (—)	$H(T = 303\text{K})$	$7.65 \cdot 10^{-6} \text{ mol}/\text{Pa}/\text{m}^3$
S_{lr}	0.4 (—)	M_l	$10^{-2} \text{ kg}/\text{mol}$
S_{gr}	0 (—)	M_g	$2 \cdot 10^{-3} \text{ kg}/\text{mol}$
		ρ_l^{std}	$10^3 \text{ kg}/\text{m}^3$
		ρ_g^{std}	$8 \cdot 10^{-2} \text{ kg}/\text{m}^3$

■ Pression capillaire et perméabilités relative: Modèle de Van Genuchten

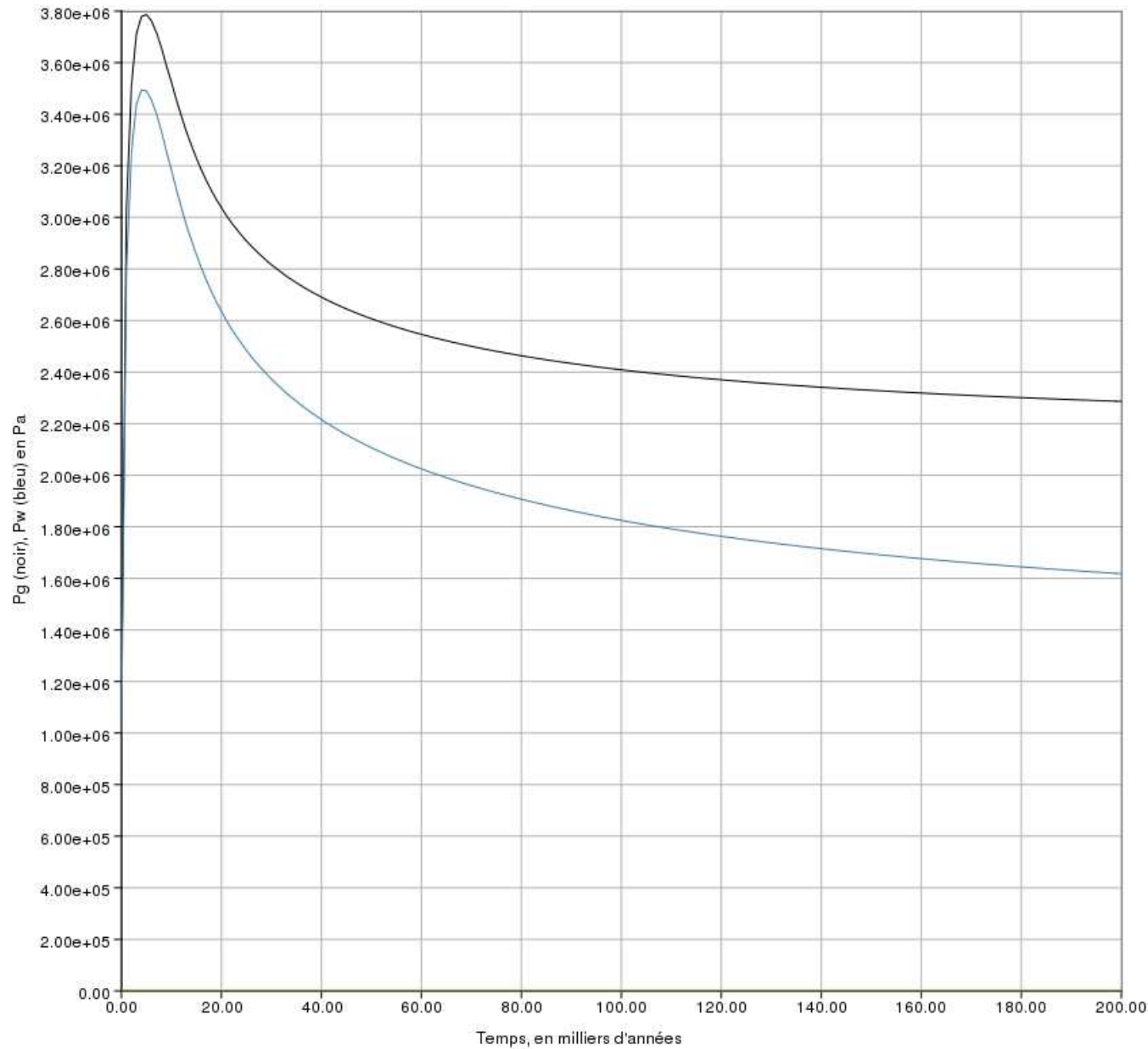
$$p_c = P_r \left(S_{le}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n}, \quad kr_l = \sqrt{S_{le}} \left(1 - \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^m \right)^2 \quad \text{et} \quad kr_g = \sqrt{1 - S_{le}} \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^{2m}$$

avec
$$S_{le} = \frac{S_l - S_{lr}}{1 - S_{lr} - S_{gr}} \quad \text{et} \quad m = 1 - \frac{1}{n}$$

MOMAS1b - Maillage et saturation initiale



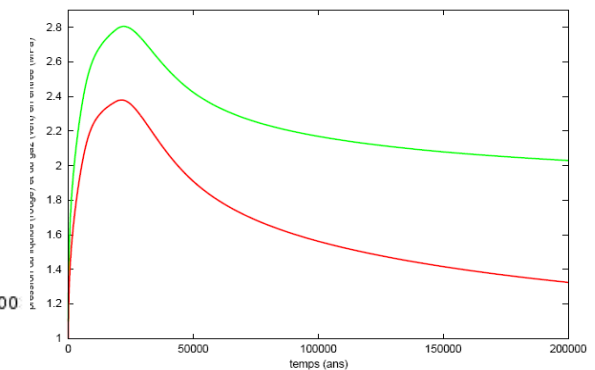
Evolution des pressions au cours du temps



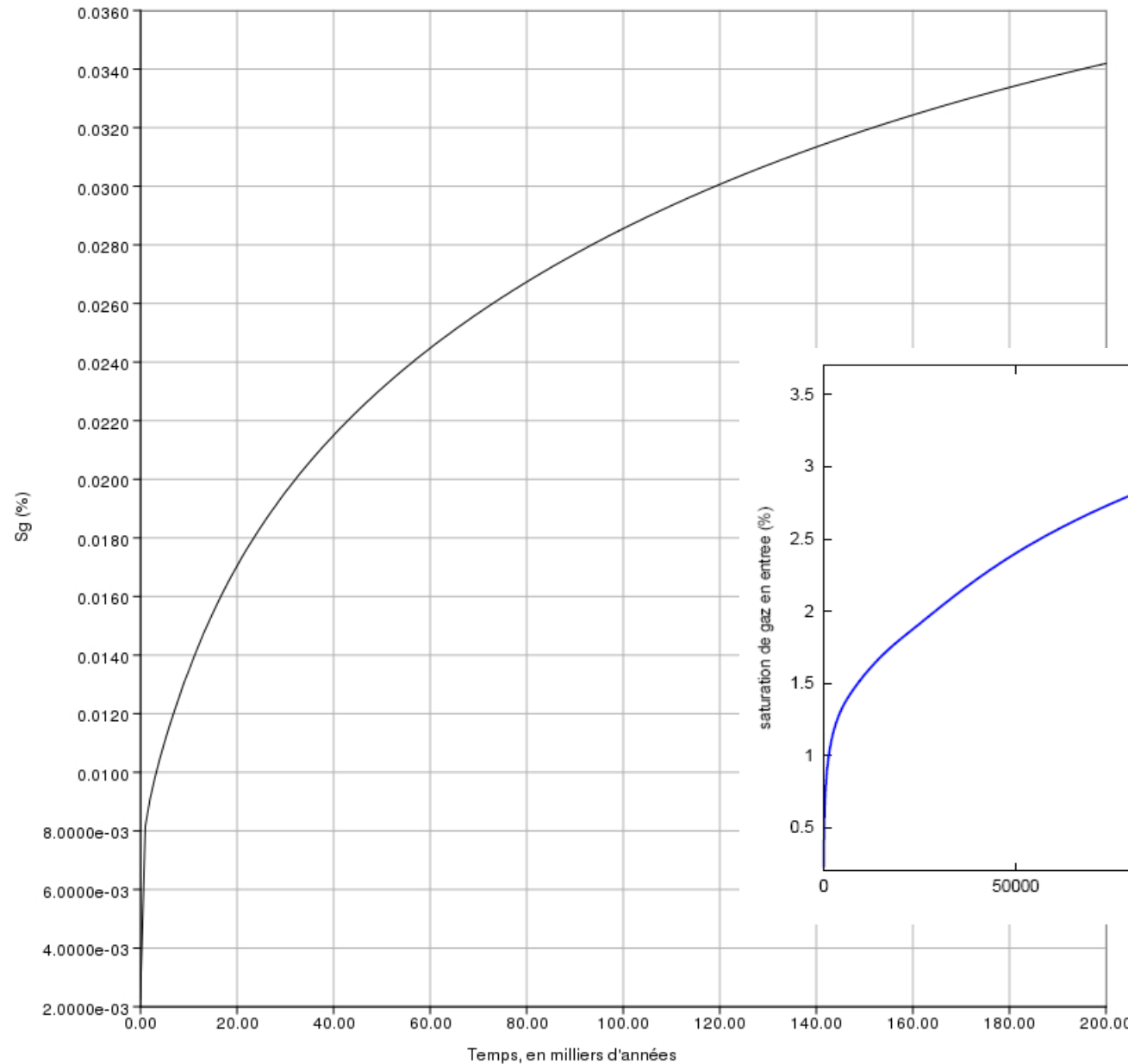
MOMAS1b Pressions in

- Pression de l'eau: bleu
- Pression de gaz: noir

Résultats de F. Smaï

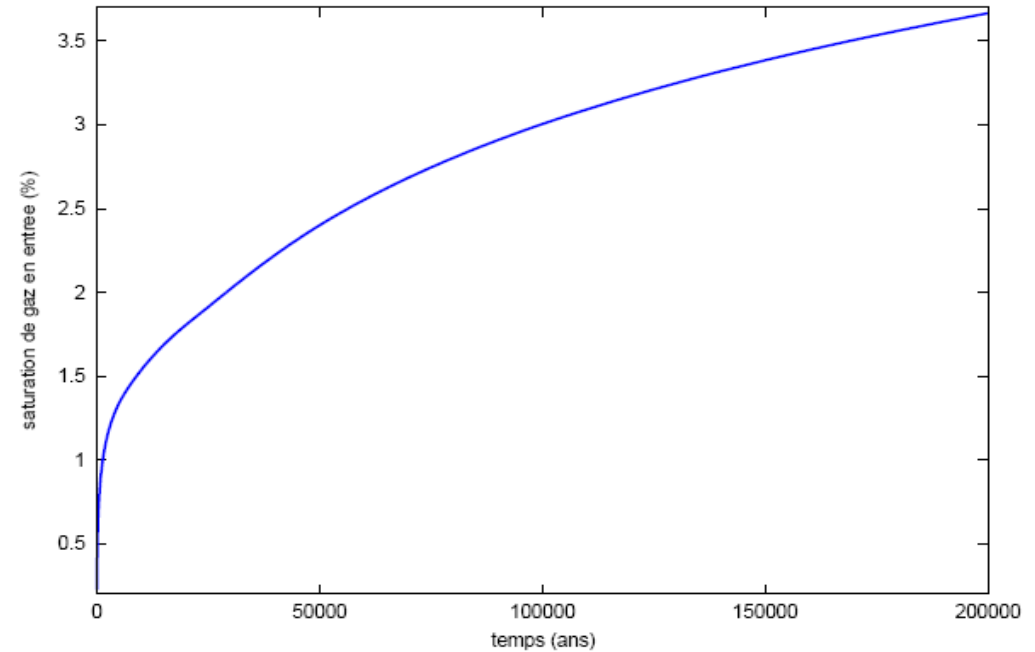


Evolution de la saturation de gaz S_g en entrée au cours du temps



MOMAS1b

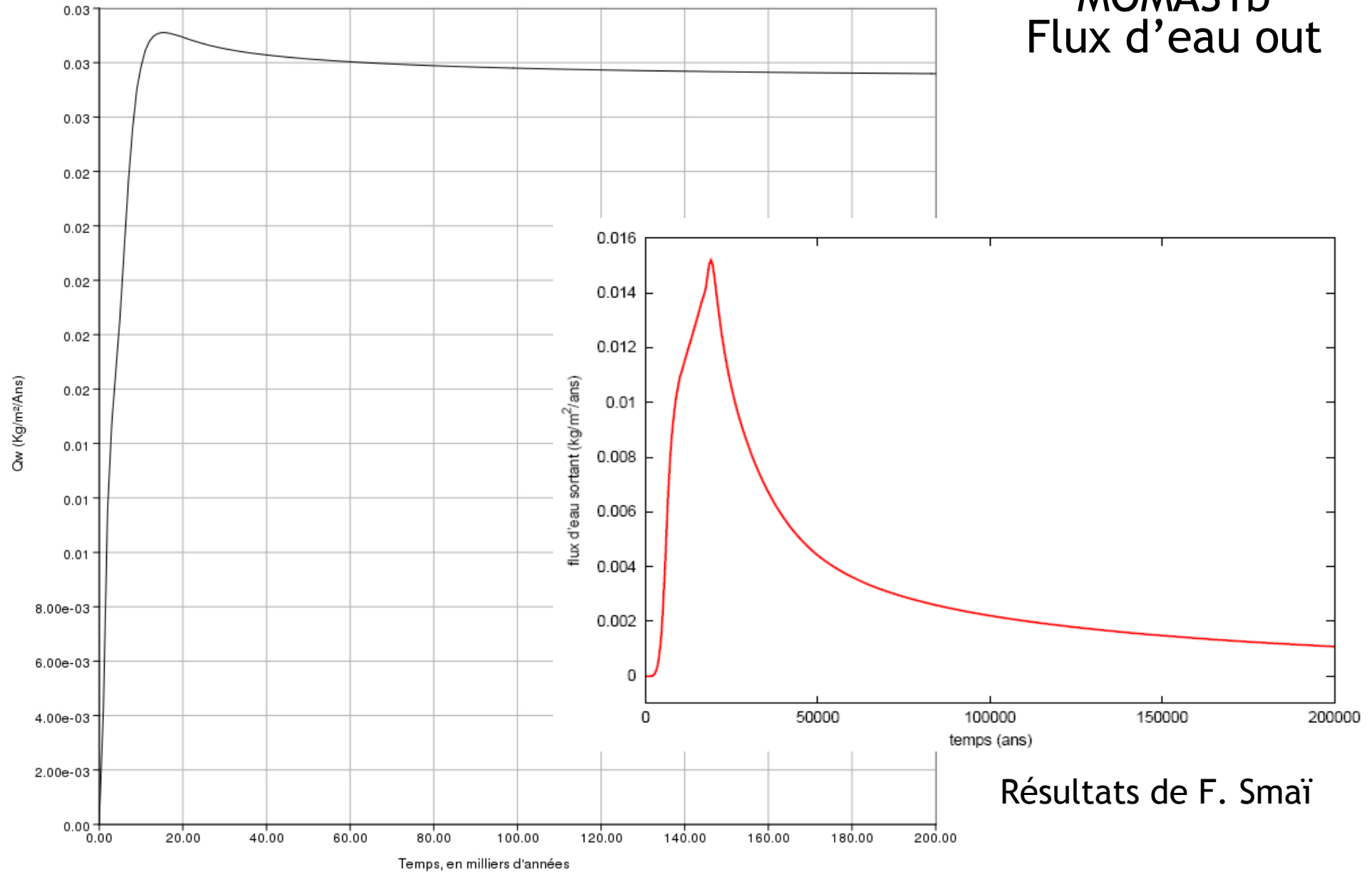
Saturation de gaz in



Résultats de F. Smäi

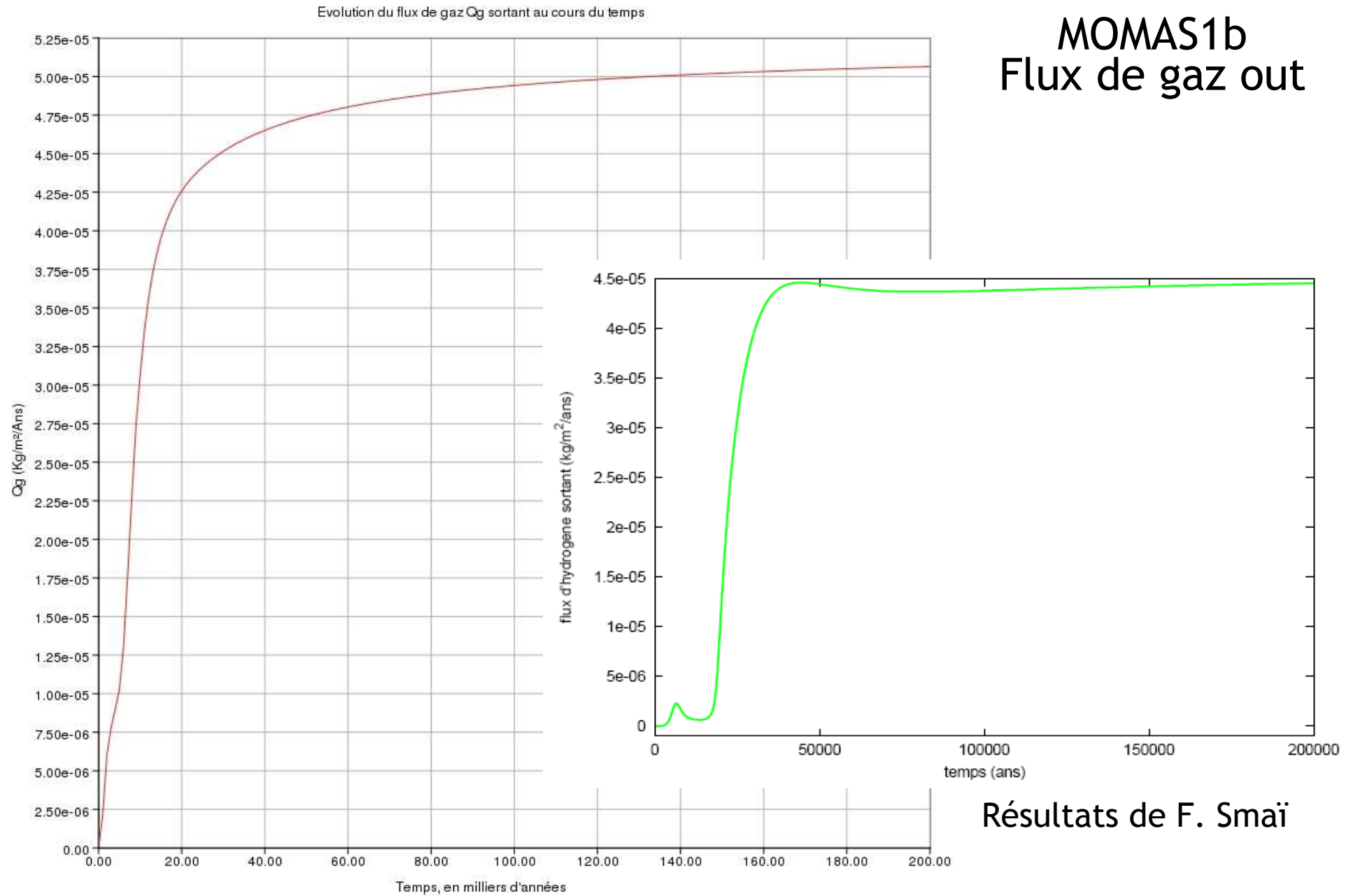
MOMAS1b Flux d'eau out

Evolution du flux d'eau Qw sortant au cours du temps



Résultats de F. Smaï

MOMAS1b Flux de gaz out



Résultats de F. Smaï

MOMAS2

■ **Domaine Ω en géométrie 2D: 2 matériaux**

➤ $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 = ([0,20] \cup [0,200]) \times [0,20]$

■ **Conditions initiales: A l'équilibre**

➤ Pression gaz = $1.5 \cdot 10^6$ Pa sur Ω

➤ Pression de liquide = 10^6 sur Ω

■ **Conditions bords:**

➤ Flux nul sur toute la frontière extérieure de Ω

➤ Injection d'hydrogène à gauche (in) => Flux d'hydrogène

➤ Conditions de Dirichlet à droite (out)

■ **Temps de simulation : $T_{\max} = 10^6$ ans**

■ **Echanges entre phases non modélisés dans Migastra**

MOMAS2 - Paramètres

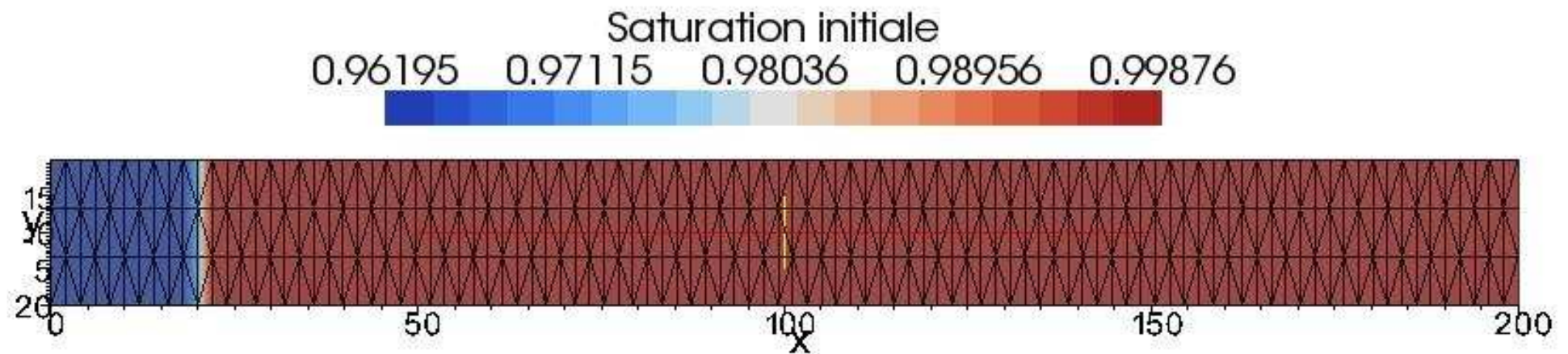
Milieu poreux				Caractéristiques des fluides		
Paramètre	Valeur selon le domaine			Paramètre	Valeur	
	Ω_b		Ω_c			
k	10^{-18}	m^2	$5 \cdot 10^{-20}$	m^2	D_l^h	$3 \cdot 10^{-9}$ m^2/s
Φ	0.3	(-)	0.15	(-)	μ_l	$1 \cdot 10^{-3}$ $Pa.s$
P_r	$2 \cdot 10^6$	Pa	$15 \cdot 10^6$	Pa	μ_g	$9 \cdot 10^{-6}$ $Pa.s$
n	1.54	(-)	1.49	(-)	$H(T = 303K)$	$7.65 \cdot 10^{-6}$ $mol/Pa/m^3$
S_{lr}	0.01	(-)	0.4	(-)	M_l	10^{-2} kg/mol
S_{gr}	0	(-)	0	(-)	M_g	$2 \cdot 10^{-3}$ kg/mol
					ρ_l^{std}	10^3 kg/m^3
					ρ_g^{std}	$8 \cdot 10^{-2}$ kg/m^3

■ Pression capillaire et perméabilités relative: Modèle de Van Genuchten

$$p_c = P_r \left(S_{le}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n}, \quad kr_l = \sqrt{S_{le}} \left(1 - (1 - S_{le}^{1/m})^m \right)^2 \quad \text{et} \quad kr_g = \sqrt{1 - S_{le}} \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^{2m}$$

$$\text{avec} \quad S_{le} = \frac{S_l - S_{lr}}{1 - S_{lr} - S_{gr}} \quad \text{et} \quad m = 1 - \frac{1}{n}$$

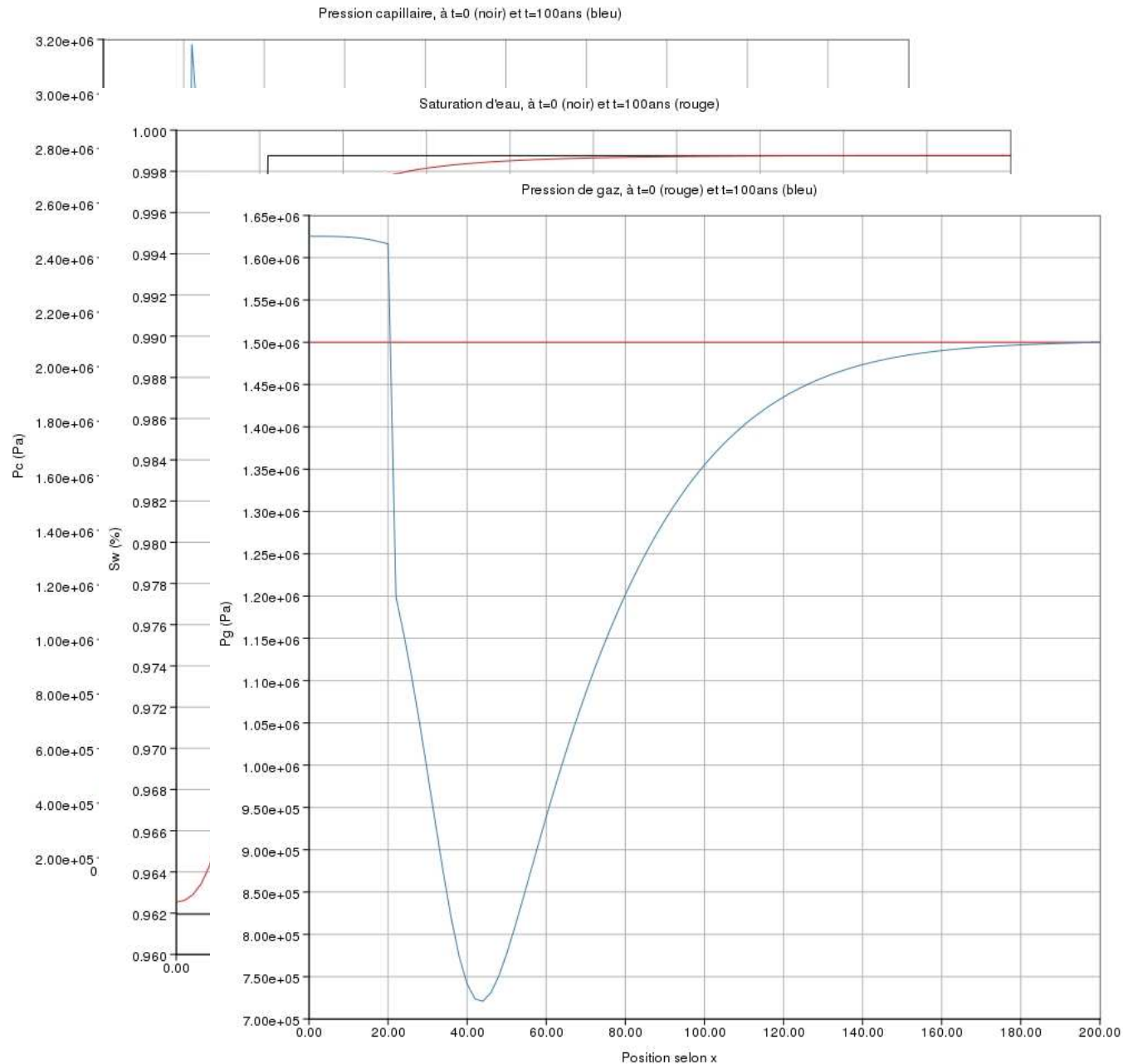
MOMAS2 - Maillage et saturation initiale



MOMAS2 Résultats

Aucune injection
d'hydrogène
=> État stationnaire
attendu

Apparition de
discontinuités!



Conclusions et perspectives

- Formulation Volume Finis - Eléments finis n'a pas abouti
- Résolution par Elément Finis fully implicite fonctionne pour des conditions initiales hors équilibre.
- Régler le problème des conditions initiales à l'équilibre en multimatériaux.
- Envisager des termes de stabilisation

MERCI POUR VOTRE ATTENTION

Matthieu Aussal