



énergie atomique • énergies alternatives

F. Caro, B. Saad et M. Saad

CEA Saclay

DEN/DANS/DM2S/SFME

Journée MOMAS, 23 septembre 2010

Plan



énergie atomique • énergies alternatives

- Résultats MPCube
 - Modèle physique
 - Modèle mathématique
 - Schéma numérique
 - Résultats numériques

- Relaxation du modèle physique
 - Modèle physique
 - Un résultat théorique
 - Schéma numérique
 - Résultats numériques

- Conclusions et perspectives

Contexte physique



énergie atomique • énergies alternatives

Modèle d'écoulement diphasique (liquide/vapeur) à deux composants (eau/hydrogène) en milieu poreux

- Conservation de la masse de chaque composant

$$\begin{cases} \partial_t(\Phi\rho) + \text{div}(\rho u) = Q \\ \partial_t(\Phi\rho^{H_2}) + \text{div}\left((\rho u)^{H_2} - \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} D_{\alpha} \nabla c_{\alpha}\right) = Q^{H_2} \end{cases}$$

- Φ = porosité supposée ne dépendre que de l'espace
- Tenseur de diffusion D_{α} fonction non linéaire de la saturation liquide et de la pression de gaz
- c_{α} = concentration de l'hydrogène dans la phase α

Contexte physique



énergie atomique • énergies alternatives

Hypothèses physiques

- Ecoulement de Darcy pour chaque phase :

$$u_\alpha = -k \frac{k_{r_\alpha}(S_l)}{\mu_\alpha} \nabla P_\alpha$$

- Pression capillaire entre la pression de gaz et la pression liquide :
 $P_g - P_l = P_c(S_l)$
- Ecoulement isotherme
- Phase gazeuse compressible (gaz parfait) et phase liquide incompressible
- Lois de Van Genuchten-Mualen pour les perméabilités relatives et la pression capillaire

Modèle mathématique



énergie atomique • énergies alternatives

Modèle mathématique :

$$M(u, v) \partial_t \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} - \operatorname{div} \left(A(u, v) \begin{bmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{bmatrix} \right) = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u \\ \mathcal{F}_v \end{pmatrix},$$

où u et v représentent les inconnues choisies, $M \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ et $A \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ sont des matrices dépendants non linéairement des inconnues choisies.

Inconnues utilisées : saturation liquide et pression de gaz

Schéma numérique



énergie atomique • énergies alternatives

Schéma numérique VF Diamant pour la discrétisation en espace

$$\mathcal{M}(u, v) \partial_t \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} - \left(\mathcal{A}(u, v) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u \\ \mathcal{F}_v \end{pmatrix}.$$

Schéma d'Euler implicite pour la discrétisation temporelle

$$\frac{\mathcal{M}(u^{n+1}, v^{n+1})}{\Delta t} \begin{bmatrix} u^{n+1} - u^n \\ v^{n+1} - v^n \end{bmatrix} - \mathcal{A}(u^{n+1}, v^{n+1}) \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ v^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u \\ \mathcal{F}_v \end{pmatrix}.$$

Méthode de point fixe pour la résolution (globale) du système non linéaire d'inconnues u_{n+1} et v_{n+1}

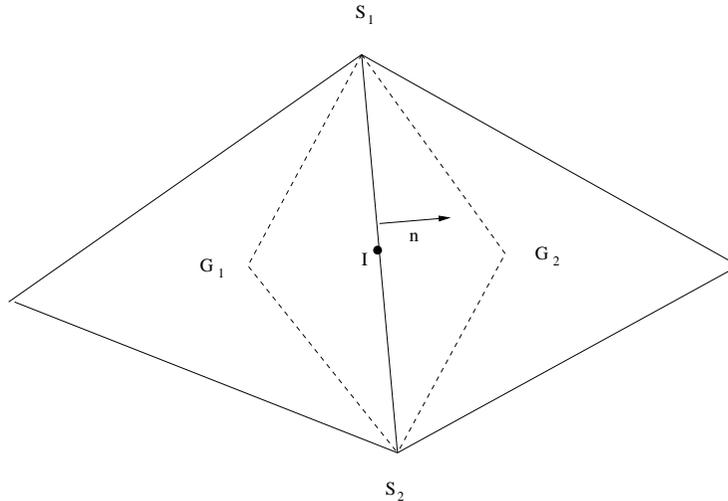
$$\frac{\mathcal{M}(u_k^{n+1}, v_k^{n+1})}{\Delta t} \begin{bmatrix} u_{k+1}^{n+1} - u_k^n \\ v_{k+1}^{n+1} - v_k^n \end{bmatrix} - \mathcal{A}(u_k^{n+1}, v_k^{n+1}) \begin{bmatrix} u_{k+1}^{n+1} \\ v_{k+1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u \\ \mathcal{F}_v \end{pmatrix}.$$

Schéma de discrétisation pour les termes de diffusion



énergie atomique • énergies alternatives

Méthode VF Diamant : intégration du flux sur la cellule diamant $G_1S_1G_2S_2$ (résolution de $-\text{div}(D\nabla u) = f$ dans un domaine + CL)



\implies expression du flux $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ sur la face S_1S_2 (\mathbf{n} normale à la face S_1S_2 de norme S_1S_2)

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \frac{\mathbf{n} \cdot (K^1 \mathbf{n}) \mathbf{n} \cdot (K^2 \mathbf{n})}{\mathbf{n} \cdot (K^1 \mathbf{n}) + \mathbf{n} \cdot (K^2 \mathbf{n})} (u_{G_2} - u_{G_1}) + \sum_{k=0}^1 \left[\frac{\mathbf{n} \cdot (K^2 \mathbf{r}_k^2) \mathbf{n} \cdot (K^1 \mathbf{n}) + \mathbf{n} \cdot (K^1 \mathbf{r}_k^1) \mathbf{n} \cdot (K^2 \mathbf{n})}{\mathbf{n} \cdot (K^1 \mathbf{n}) + \mathbf{n} \cdot (K^2 \mathbf{n})} \right] u_{S_k}$$

avec $K^i = D_i / (2V_i)$, $\mathbf{r}_k^1 = \mathbf{n}_{G_1S_k} + \mathbf{n}/2$, $\mathbf{r}_k^2 = \mathbf{n}_{G_1S_k} - \mathbf{n}/2$ et reconstruction des u_{S_k} à l'aide des u_{G_i} en utilisant une méthode SVD.

Cas test MOMAS CI hors équilibre



énergie atomique • énergies alternatives

- Condition initiale

$$(P_l, P_g) = (10, 1.5) \text{ bar sur } [0, \frac{1}{2}], (P_l, P_g) = (10, 2.5) \text{ bar sur } [\frac{1}{2}, 1]$$

- Conditions aux limites de type Neumann

- Pas de temps : progression géométrique (raison 1.1) et seuil à 833.

- Pas d'espace : 0.016

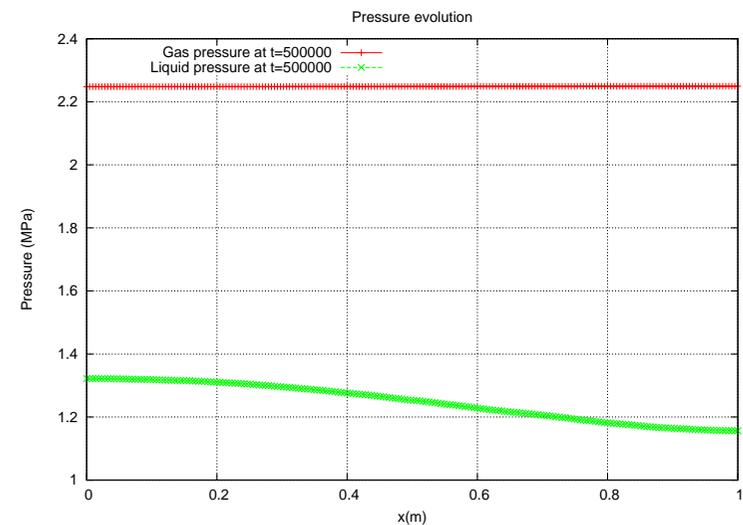
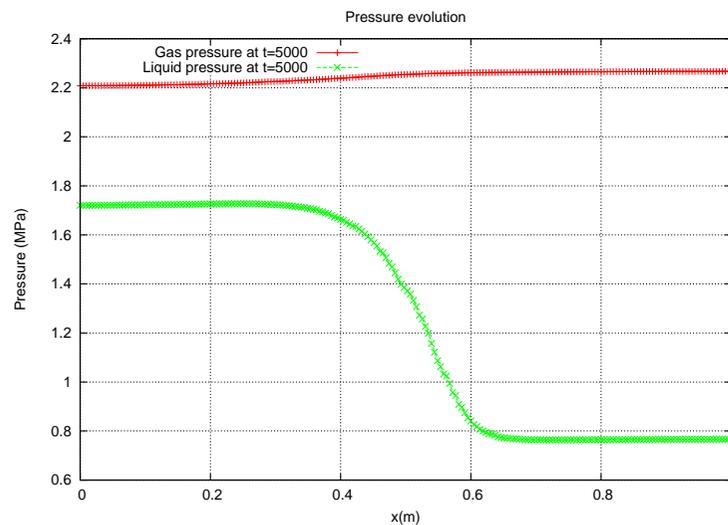
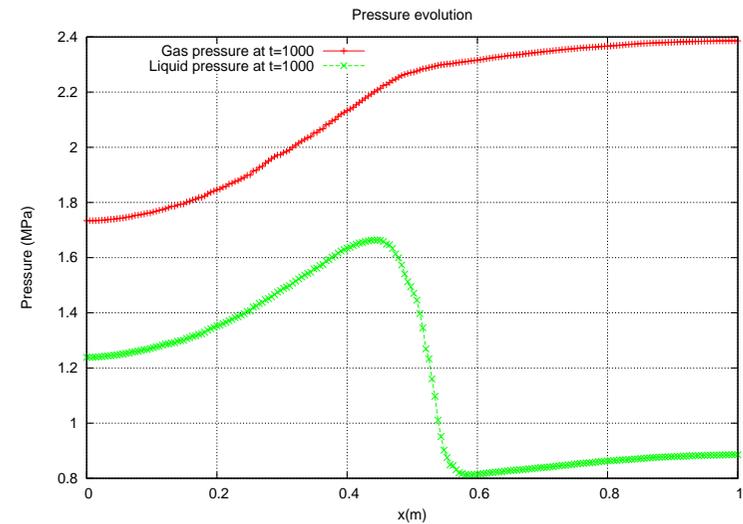
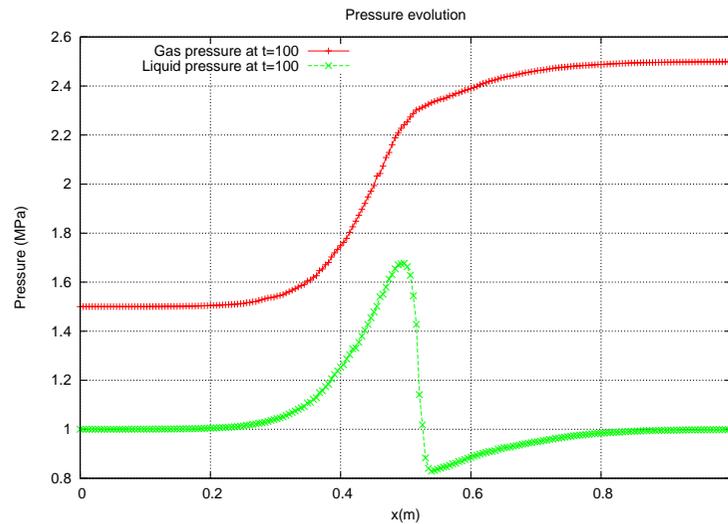
- Paramètres physiques

Milieu poreux		Caractéristiques des fluides	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
k [m ²]	10^{-16}	D_l [m ² · s ⁻¹]	3×10^{-9}
Φ [-]	0.3	μ_l [Pa · s]	1×10^{-3}
P_r [Pa]	2×10^6	μ_g [Pa · s]	9×10^{-6}
n [-]	1.54	H^{H_2} [mol · Pa ⁻¹ · m ⁻³]	7.65×10^{-6}

Pression liquide, pression gaz, cas test MOMAS



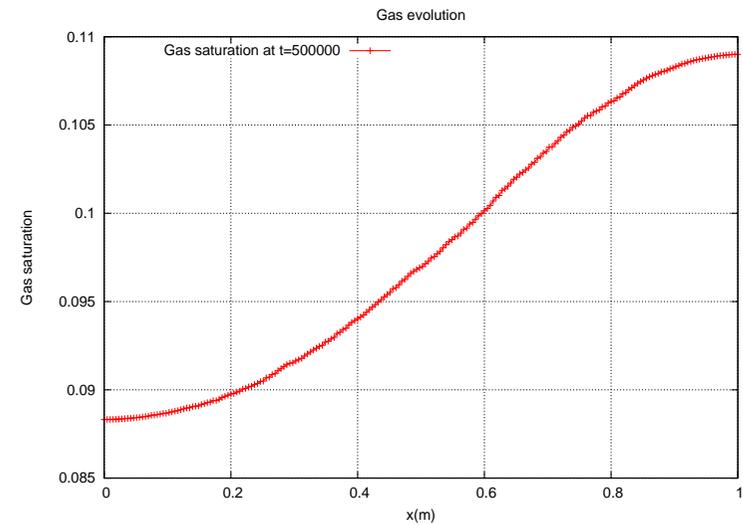
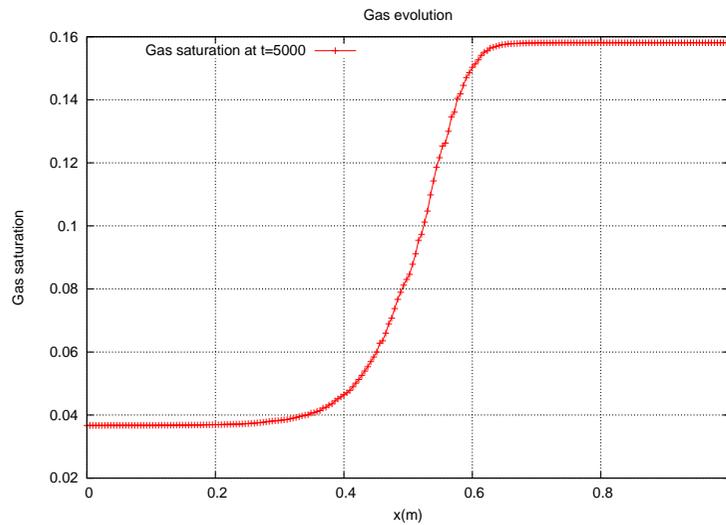
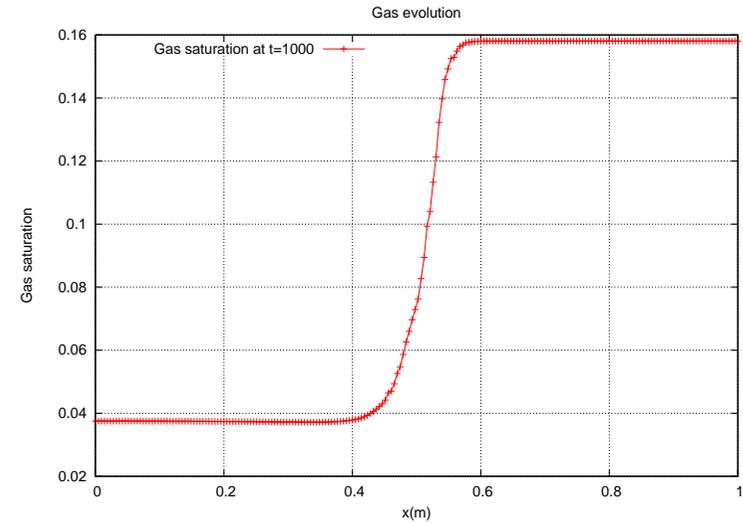
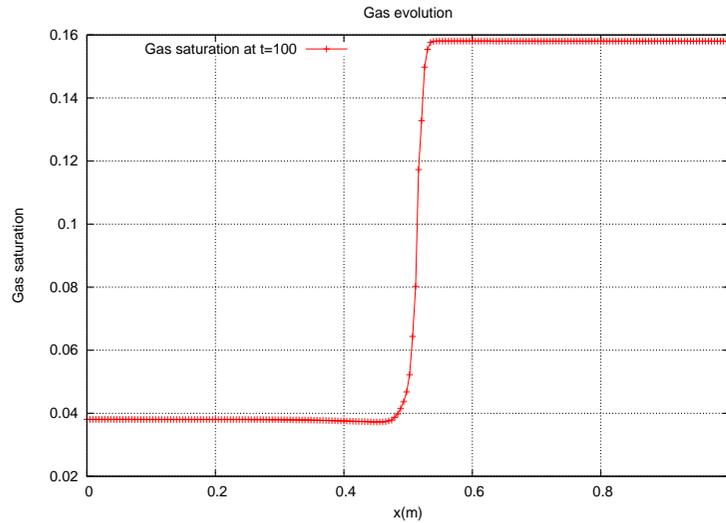
energie atomique • energies alternatives



Saturation de gaz, cas test MOMAS



energie atomique • energies alternatives



Cas test MOMAS milieu hétérogène



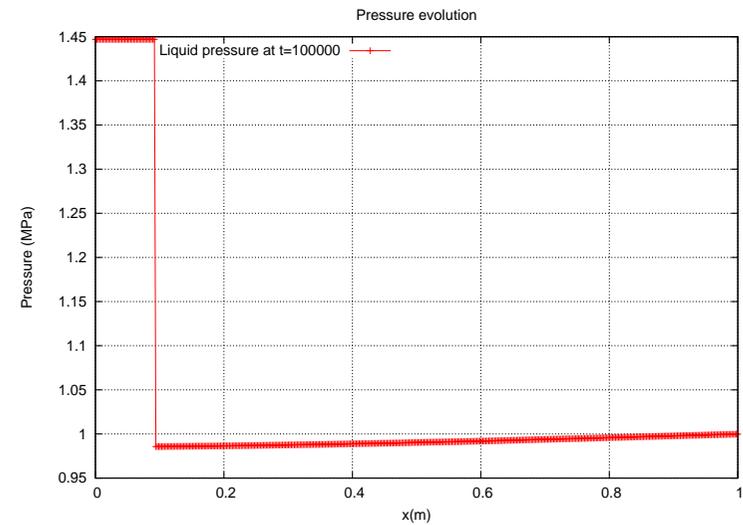
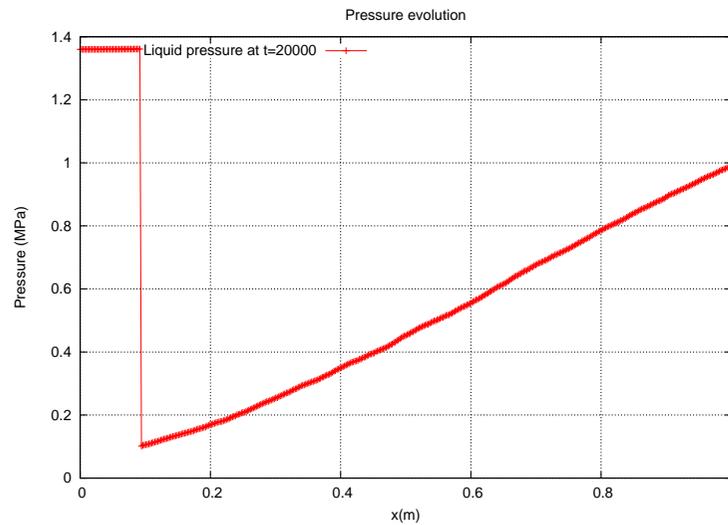
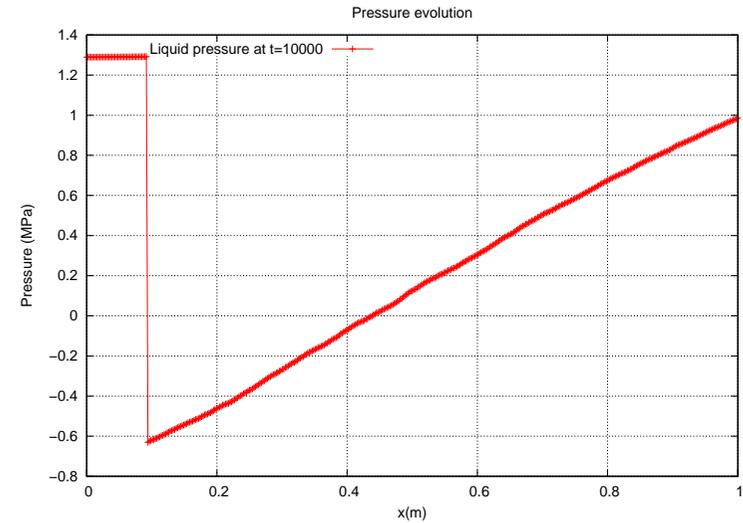
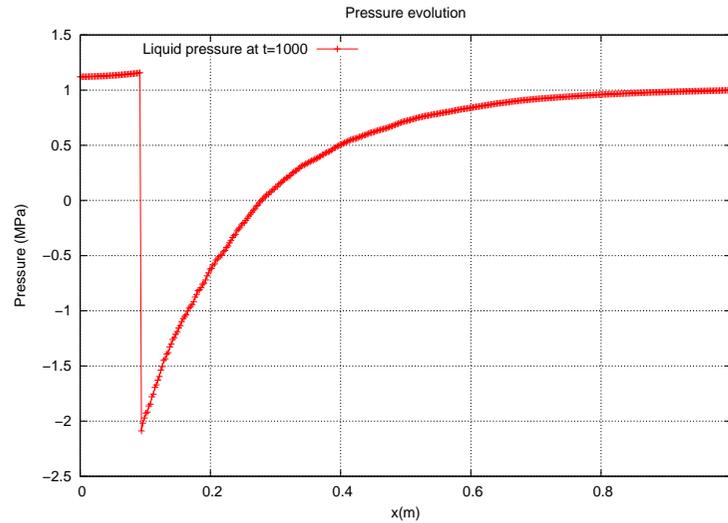
énergie atomique • énergies alternatives

- Condition initiale : $P_l = 1$ bar et $P_g = 1.5$ bar
- Pas de flux de gaz à gauche du domaine
- Pas de temps : progression géométrique (raison 1.01) et seuil à 20000.
- Pas d'espace : 2
- Paramètres physiques : ceux donnés dans le cas test

Pression liquide milieu hétérogène



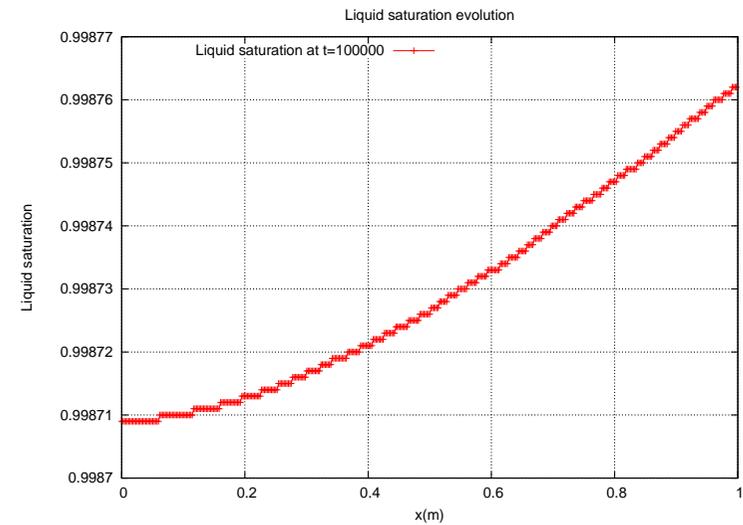
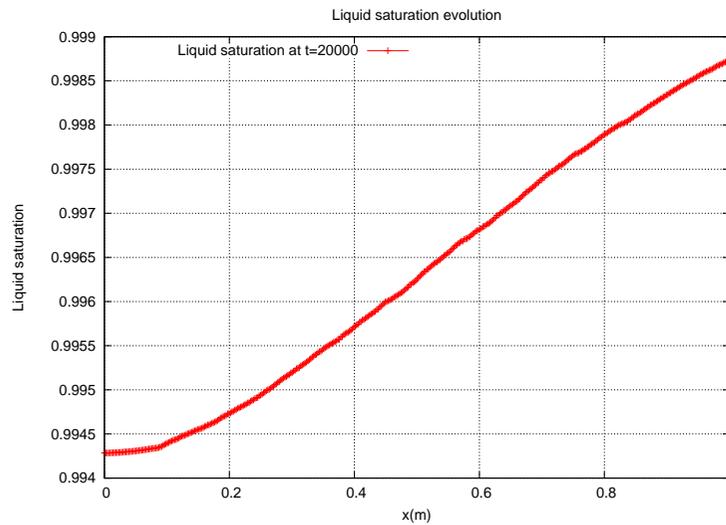
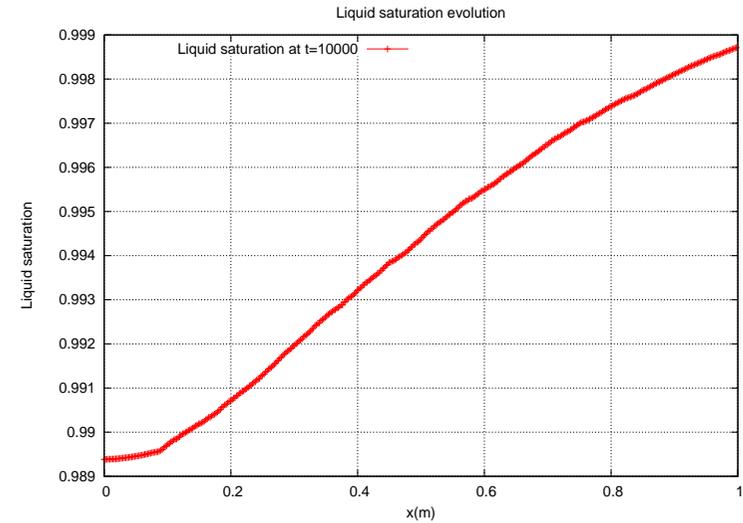
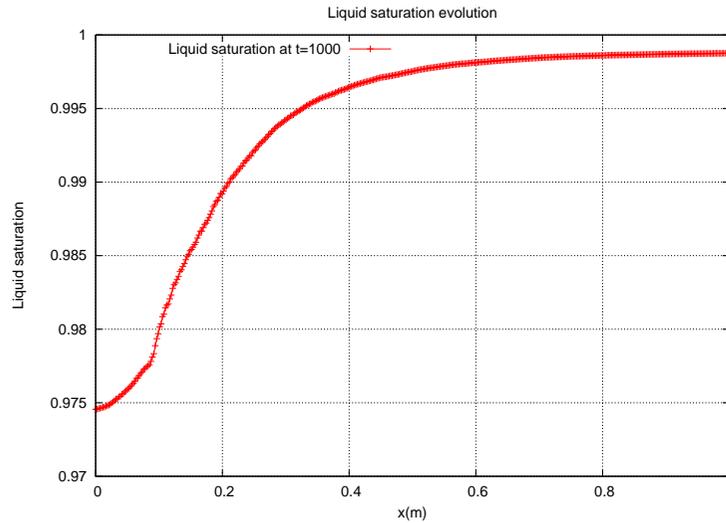
énergie atomique • énergies alternatives



Saturation liquide, milieu hétérogène



énergie atomique • énergies alternatives



Cas test MOMAS BO-BG



énergie atomique • énergies alternatives

Problème de pression de gaz négative

Nouveau modèle : obtenu par relaxation



énergie atomique • énergies alternatives

Prescription d'un flux de masse (dynamique) entre l'hydrogène dissous et l'hydrogène gazeux :

Transfert de masse entre l'hydrogène gazeux et l'hydrogène dissous

$$\sigma = -\gamma\rho_l(c_l - c_{eq})$$

où c_{eq} représente une concentration d'équilibre et γ l'inverse du temps caractéristique de retour à l'équilibre entre l'hydrogène dissous et l'hydrogène gazeux

Modèle devient

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\Phi\rho_l S_l) + \text{div}(\rho_l u_l) = \sigma + Q_l \\ \partial_t(\Phi\rho_g S_g) + \text{div}(\rho_g u_g) = -\sigma + Q_g \\ \partial_t(\Phi\rho_l S_l c_l) + \text{div}(\rho_l c_l u_l - \rho_l D_l \nabla c_l) = \sigma + Q_l^{H_2}. \end{array} \right.$$

Théorème



énergie atomique • énergies alternatives

On cherche une solution définie sur un ouvert Ω borné régulier de \mathbb{R}^3 avec des conditions aux limites de type Dirichlet homogène sur une partie Γ_1 de $\partial\Omega$ et de type Neumann sur le reste de $\partial\Omega$. Nous avons alors le résultat

Théorème (B. Saad) : Sous les certaines hypothèses sur les paramètres physiques soient P_l^0, P_g^0 , et c_l^0 les conditions initiales définies presque partout dans Ω , si cette condition initiale est dans $L^2(\Omega)$ alors il existe (P_l, P_g, c_l) solution faible du modèle avec transfert de masse dynamique. De plus (P_l, P_g, c_l) vérifie

$$P_\alpha \in L^2(0, T; H_{\Gamma_1}^1(\Omega)), \quad \Phi \partial_t(\rho_\alpha(P_\alpha) S_\alpha) \in L^2(0, T; (H_{\Gamma_1}^1(\Omega))')$$

$$\Phi \partial_t(\rho_l(P_l) S_l c_l) \in L^2(0, T; (H_{\Gamma_1}^1(\Omega))')$$

$$0 \leq S_\alpha \leq 1 \text{ et } \beta(S_l) \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$$

$$c_l \in L^2(0, T; H_{\Gamma_1}^1(\Omega)) \text{ et } 0 \leq c_l \leq c_{eq}$$

Modèle mathématique et schéma numérique



énergie atomique • énergies alternatives

Modèle mathématique : même formalisme qu'avec un modèle utilisant la loi de Henry

Objectif : Retrouver à l'aide du modèle avec flux de masse dynamique les solutions numériques du modèle avec flux de masse statique (loi de Henry) \implies nous supposons que c_{eq} est une fonction de la saturation liquide et de la pression de gaz de tel sorte que

$$c_l = c_{\text{eq}} \Leftrightarrow \rho_l^{H_2} = K^{H_2} M^{H_2} P_g^{H_2} \text{ (loi de Henry)}$$

Pour ne pas avoir à intégrer une EDO raide et ne connaissant pas physiquement la cinétique du changement de phase hydrogène gazeux–hydrogène dissous, on impose formellement $\gamma = +\infty$ dans le modèle (rappel transfert de masse $\sigma = -\gamma\rho_l(c - c_{\text{eq}})$)

Choix d'une méthode de splitting en temps : intégration des termes différentiels dans un premier temps puis projection sur la variété d'équilibre $\{c_l = c_{\text{eq}}\}$ ensuite

Schéma numérique : première étape



énergie atomique • énergies alternatives

Notant \mathcal{U} le vecteur inconnu discrétisé ($3 \times$ nombre d'éléments), nous discrétisons dans un premier temps les termes différentiels

- Méthode de différences finies pour la discrétisation en espace

$$\mathcal{M}(\mathcal{U})\partial_t\mathcal{U} - \mathcal{A}(\mathcal{U})\mathcal{U} = \mathcal{F}_\mathcal{U}$$

- Schéma d'Euler implicite pour la discrétisation temporelle

$$\mathcal{M}(\mathcal{U}^*)\frac{\mathcal{U}^* - \mathcal{U}^n}{\Delta t} - \mathcal{A}(\mathcal{U}^*)\mathcal{U}^{n+1} = \mathcal{F}_\mathcal{U}^n$$

- Méthode de point fixe pour une résolution globale du système non linéaire avec inconnue \mathcal{U}_{k+1}^*

$$\mathcal{M}(\mathcal{U}_k^*)\frac{\mathcal{U}_{k+1}^* - \mathcal{U}_k^n}{\Delta t} - \mathcal{A}(\mathcal{U}_k^*)\mathcal{U}_{k+1}^{n+1} = \mathcal{F}_\mathcal{U}^n$$

→ donne un état intermédiaire \mathcal{U}^*

Schéma numérique : deuxième étape



énergie atomique • énergies alternatives

Remarque : si $\gamma < +\infty$, $\partial_t(\rho_l S_l + \rho_g S_g) = 0$ et $\partial_t(\rho_g S_g + \rho_l S_l c_l) = 0$
→ conservation de ces quantités aux niveau discret

Schéma numérique (suite)

Projection sur la variété $\{c_l = c_{eq}\}$ pour trouver \mathcal{U}^{n+1} avec la contrainte

$$(\rho_l S_l)_i^{n+1} + (\rho_g S_g)_i^{n+1} = (\rho_l S_l)_i^* + (\rho_g S_g)_i^*$$

$$(\rho_l S_l c_l)_i^{n+1} + (\rho_g S_g)_i^{n+1} = (\rho_l S_l c_l)_i^* + (\rho_g S_g)_i^*$$

Revient à trouver le zéro d'une fonction non linéaire dans chaque maille

Validation



énergie atomique • énergies alternatives

Comparaison des résultats numériques obtenus avec ce nouveau modèle et ceux obtenus avec le modèle utilisant un flux de masse statique (loi de Henry)

- Inconnues : pression liquide, pression de gaz et densité d'hydrogène dissous
- Domaine : $\Omega = [0, 1]$
- Paramètres numériques : $\Delta t = 10^{-2}$ an, $\Delta x = 10^{-2}$ m, temps final = 1 an
- Lois de fermeture (perméabilités relatives et pression capillaire) : modèle de Van Genuchten-Mualem

Validation (comparaison)



energie atomique • energies alternatives

- Condition initiale

$$P_l = 10 \text{ bar}, P_g = 150 \text{ bar et } \rho_l^{H_2} = 0.23 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \text{ sur } [0, \frac{1}{2}]$$

$$P_l = 10 \text{ bar}, P_g = 250 \text{ bar et } \rho_l^{H_2} = 0.38 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \text{ sur } [\frac{1}{2}, 1]$$

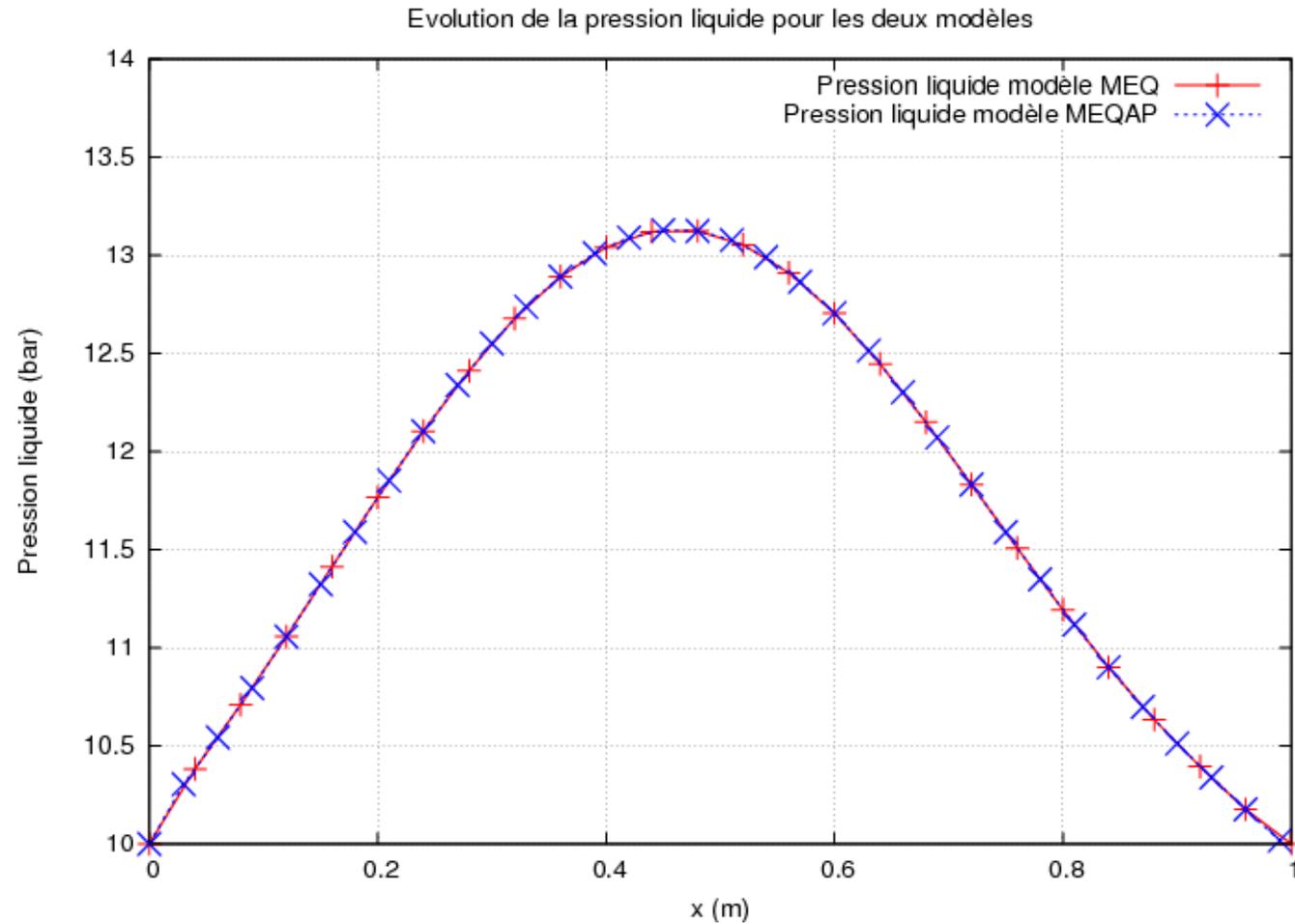
- Conditions aux limites de type Dirichlet
- Paramètres physiques

Milieu poreux		Caractéristiques des fluides	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
k [m^2]	10^{-6}	D_l [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]	1.57×10^{-14}
Φ [-]	0.3	μ_l [$\text{Pa} \cdot \text{s}$]	798×10^{-6}
P_r [Pa]	2×10^6	μ_g [$\text{Pa} \cdot \text{s}$]	9×10^{-6}
n [-]	1.54	H^{H_2} [$\text{mol} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$]	7.65×10^{-6}

Comparaison des solutions (pression liquide)



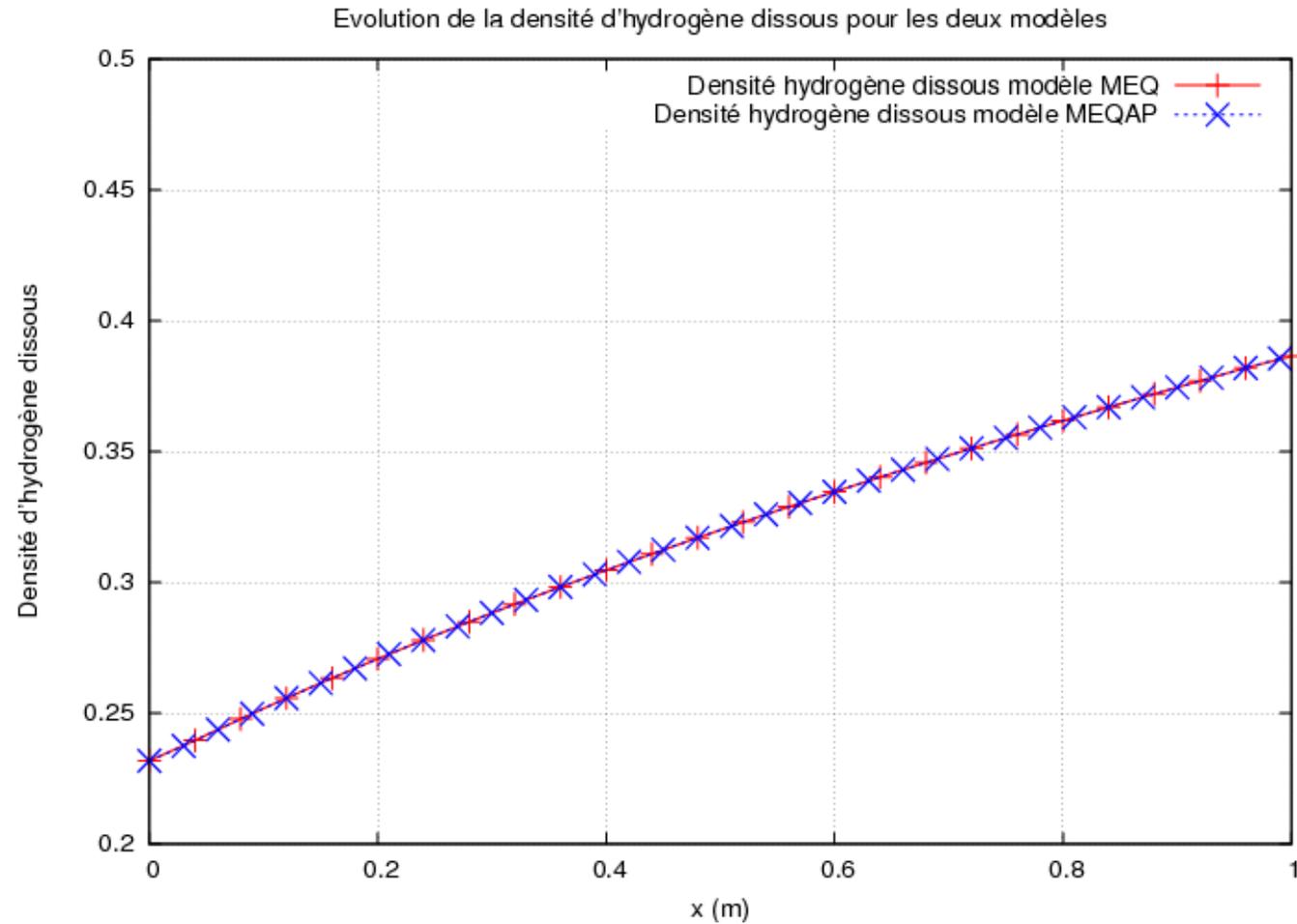
energie atomique • energies alternatives



Comparaison des solutions (densité d'hydrogène dissous)



energie atomique • energies alternatives



Cas test MOMAS CI hors équilibre



énergie atomique • énergies alternatives

- Condition initiale

$$P_l = 10 \text{ bar}, P_g = 1.5 \text{ bar sur } \left[0, \frac{1}{2}\right]$$

$$P_l = 10 \text{ bar}, P_g = 2.5 \text{ bar sur } \left[\frac{1}{2}, 1\right]$$

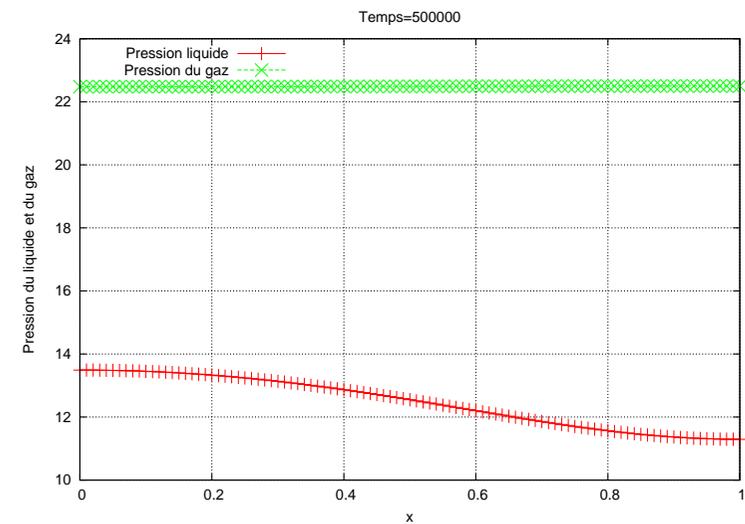
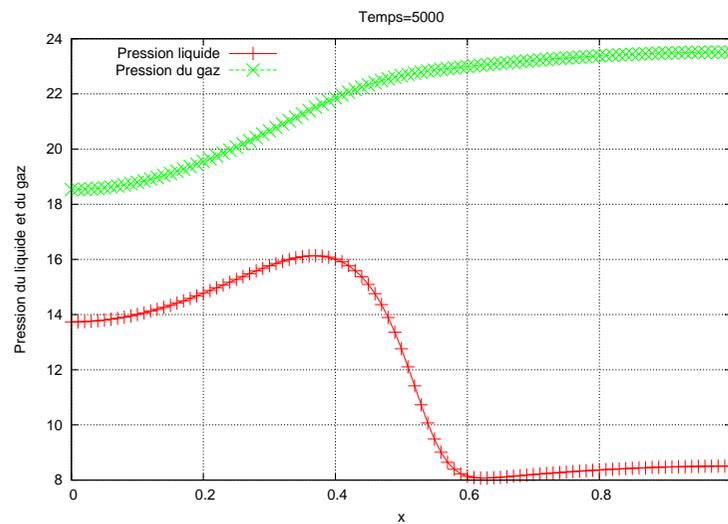
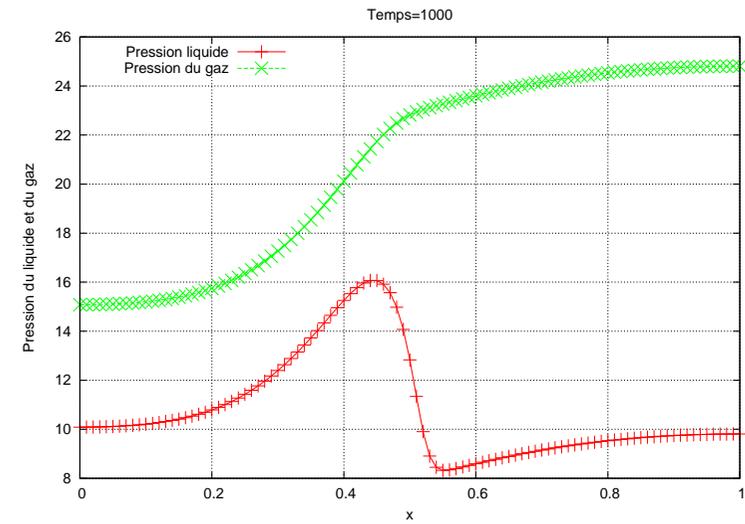
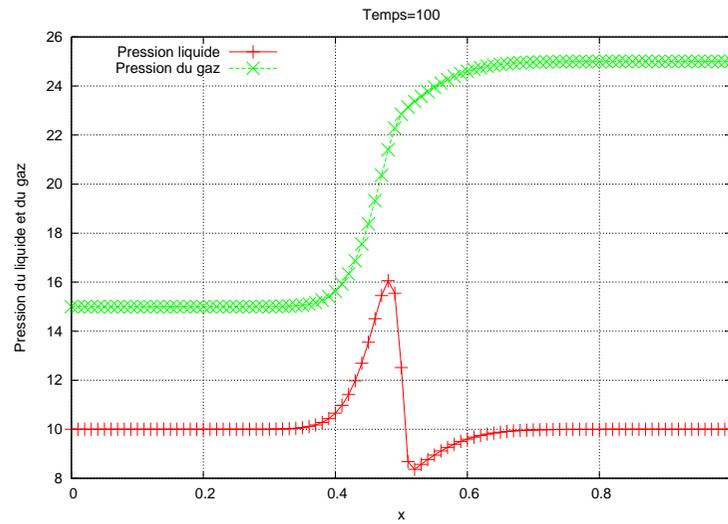
La densité d'hydrogène dissous est déduite des conditions initiales sur P_l et P_g via la loi de Henry

- Conditions aux limites de type Neumann

Cas test MOMAS CI hors équilibre : P_g et P_l



énergie atomique • énergies alternatives



Conclusions et perspectives



énergie atomique • énergies alternatives

- Etude de quelques cas tests MOMAS et mise en évidence d'un problème de pression de gaz négative avec le cas test BO-BG
- Etude théorique d'un nouveau modèle obtenu par relaxation de la loi de Henry (prescription d'un flux de masse dynamique) : existence d'une solution faible pour ce modèle, principe du maximum sur la saturation liquide et la concentration d'hydrogène dissous
- Ecriture d'un schéma numérique pour ce modèle, validation et test sur un cas MOMAS

- Etude des autres et des nouveaux cas tests MOMAS
- Ecriture et étude (convergence) d'un nouveau schéma numérique pour le modèle avec flux de masse dynamique
- Etude théorique de la limite (actuellement formelle) $\gamma \rightarrow +\infty$

Hypothèses sur les paramètres physiques



énergie atomique • énergies alternatives

1. La porosité $\Phi \in W^{1,\infty}(\Omega)$ et vérifie $0 < \Phi_0 \leq \Phi \leq \Phi_1$ pour des $\Phi_i > 0$
2. Le tenseur de perméabilité k est dans $W^{1,\infty}(\Omega)$, borné et coercif
3. Les fonctions $k_{r\alpha}$ sont continues avec $k_{r_l}(S_l = 0) = k_{r_g}(S_l = 1) = 0$ et les $M_\alpha = k_{r\alpha}/\mu_\alpha$ vérifient

$$M_l + M_g \geq m_0 > 0.$$

4. La fonction $\chi(S_l) = -\frac{M_l M_g}{M_l + M_g} \frac{dP_c}{dS_l}$ est régulière avec $\chi > 0$ si $0 < S_l < 1$ et $\chi(0) = 0$. De plus, si β est la primitive de χ , alors on suppose que β^{-1} est une fonction holdérienne d'ordre θ , avec $0 < \theta \leq 1$.
5. Le tenseur de diffusion D_l est régulier borné et coercif
6. $\rho_\alpha \in C^2(\mathbb{R})$ est croissante et vérifie $0 < \rho_m \leq \rho_\alpha(P_\alpha) \leq \rho_M$
7. La pression capillaire $P_c \in C^1([0, 1]; \mathbb{R}^+)$ et vérifie $0 < \underline{P}_c \leq \left| \frac{dP_c}{dS_l} \right|$.
8. la concentration d'équilibre c_{eq} est une constante positive.