

Couplages thermo hydro mécaniques dans les études de stockage profond de déchets nucléaires

Clément Chavant - Sylvie Granet – Roméo Fernandes
EDF R&D

Plan

- **Phénoménologie et modélisation**
- **Modélisation et discrétisation numérique**
- **3 Études**
 - ✓ La migration des gaz de corrosion
 - ✓ Couplex gaz
 - ✓ Bench mark Hydro mécanique MOMAS

Phénoménologie modélisation (1/2)

➤ Écoulements

- ✓ 2 constituants (air ou H₂ et eau) dans 2 phases (liquide et gazeuse)
- ✓ Équations de transport :

- Pressions

$$P_{gz} = P_{as} + P_{vp}$$

$$P_{lq} = P_w + P_{ad}$$

- Darcy par phases

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{M}_{lq}}{\rho_{lq}} = \frac{K^{int} \cdot k_{lq}^{rel}(S_{lq})}{\mu_{lq}} (-\nabla p_{lq} + \rho_{lq} \mathbf{g}) \\ \frac{\mathbf{M}_{gz}}{\rho_{gz}} = \frac{K^{int} \cdot k_{gz}^{rel}(S_{lq})}{\mu_{gz}} (-\nabla p_{gz} + \rho_{gz} \mathbf{g}) \end{array} \right.$$

- Vitesses

$$\frac{\mathbf{M}_{gz}}{\rho_{gz}} = (1 - C_{vp}) \frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}} + C_{vp} \frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}} \quad \left(C_{vp} = \frac{\rho_{vp}}{\rho_{gz}} \right)$$

- + diffusion + dans chaque phase

$$\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}} - \frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}} = -F_{vp} \nabla C_{vp}$$

$$\mathbf{M}_{ad} - \mathbf{M}_w = -F_{ad} \nabla \rho_{ad}$$

- équilibre (dissolution /vaporisation)

$$\frac{dp_{vp}}{\rho_{vp}} = \frac{dp_w}{\rho_w} + (h_{vp}^m - h_w^m) \frac{dT}{T}$$

$$\frac{\rho_{ad}}{M_{ad}^{ol}} = \frac{P_{ad}}{K_H}$$

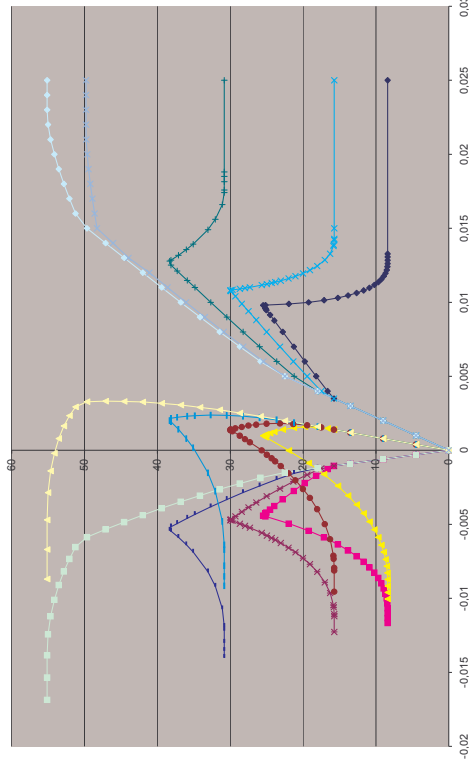
- Comportement capillaire

$$P_c = f(S_{lq}) = P_{gz} - P_{lq}$$

Phénoménologie-modélisation (2/2)

➤ Comportement mécanique

- ✓ Comportement plastique fragile pour l'argilite
- ✓ Grande dilatance en post rupture



Déformation latérale

Déformation axiale

- ✓ Gonflement des argiles de barrière ouvrages.

Difficultés de modélisation (1/3)

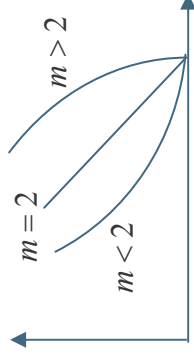
➤ Pour les écoulements

✓ Les non linéarités induisent un caractère hyperbolique

- Équation type :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u^m}{\partial x^2} = 0$$

- Apparition de fronts



- Comportement de gaz parfait + Pc élevé -> pas de notion de pression moyenne

Difficultés de modélisation(2/3)

➤ Exemple sur un problème de désaturation

✓ État initial :

Sat=0,7

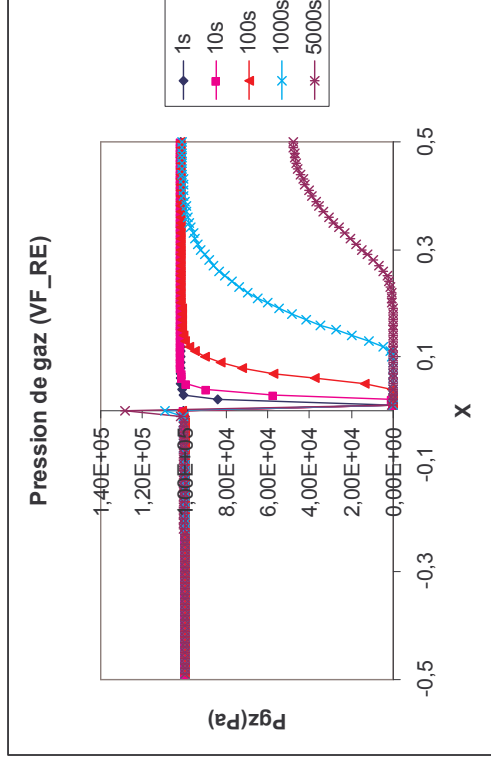
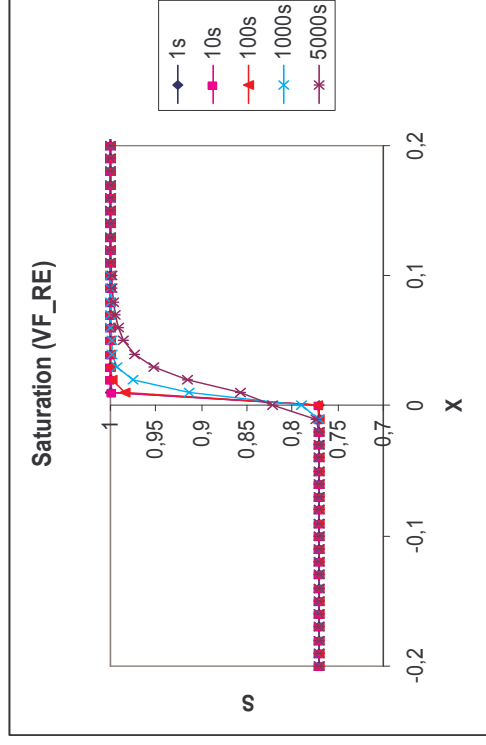
Sat=1

Porosité=0,3

Porosité=0,05

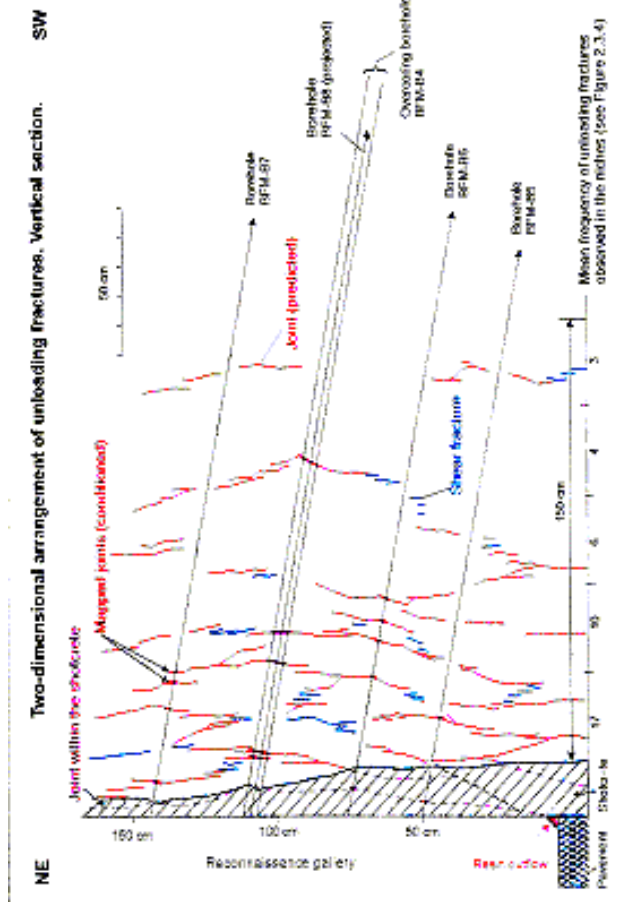
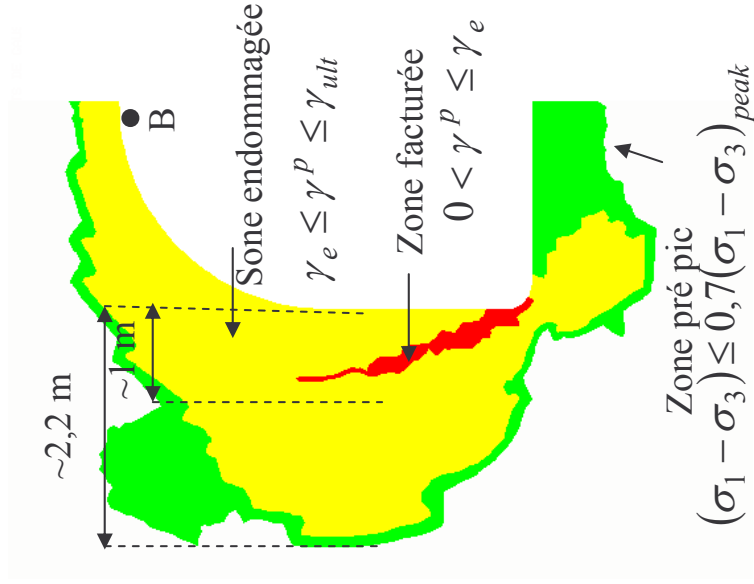
Un front de désaturation marqué

des pressions d'air nulles !



Difficultés de modélisation(3/3)

➤ Les instabilités dues au comportement fragile



Couplages (1/2)

➤ Écoulement -> Mécanique

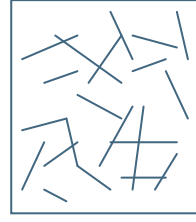
- ✓ Notion classique de pression interstitielle
- ✓ Choix d'une pression interstitielle en non saturé
 - **Prise en compte des interfaces dans écriture thermodynamique**

$$\pi = S_{\alpha} p^{\alpha} - \frac{2}{3} \int_{S_i} p_c(S) dS$$

- ✓ Conséquences mécaniques des changements de saturation

➤ Mécanique -> Écoulement

- ✓ Évolution de la perméabilité avec l'endommagement



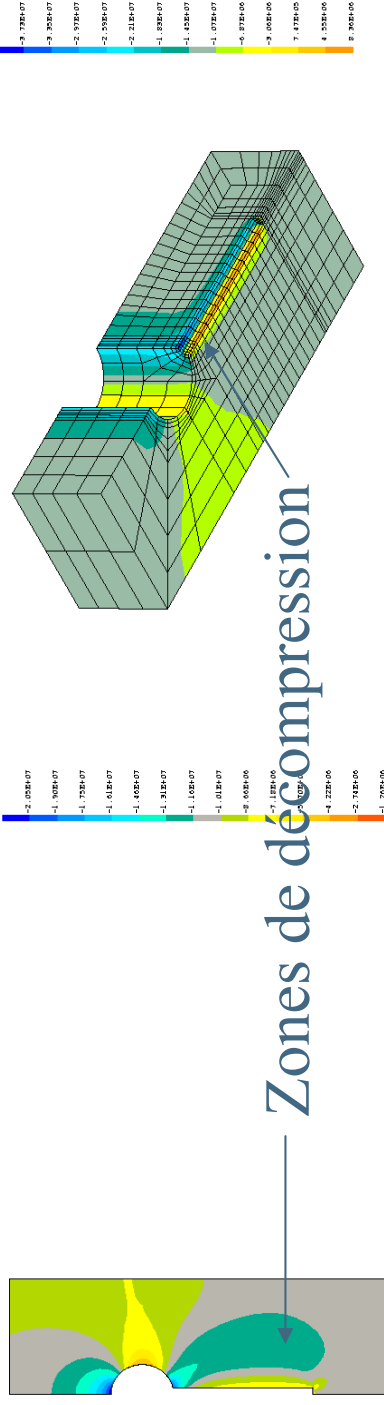
homogénéisation

En pratique loi empirique $K(\phi)$

Couplages (2/2)

➤ Thermique -> mécanique

- ✓ Phénomènes de dilatation différentielle -> claquages potentiels



➤ Thermique -> écoulement

- ✓ Variation de la viscosité
- Écoulement, mécanique -> thermique
 - ✓ Faible sauf à la marge conductibilité thermique variant avec saturation

Méthodes numériques pour l'écoulement

➤ Choix des variables en insaturé

✓ variables Pression capillaire/pression de gaz

- La conservation de la masse dégénère en $S=1$

$$\varphi \frac{\partial(\rho_a(1-S))}{\partial t} - \nabla(\rho_a k_a(S) \nabla p_a) = 0$$

✓ variables Saturation/pression d'eau

- La conservation de la masse donne :

$$\varphi(1-S) \frac{\partial p_e}{\partial t} + \varphi(g(S) - p_e) \frac{\partial S}{\partial t} - \nabla[p_a h(S) \nabla S] - \nabla[p_a k_a(S) \nabla p_e] = 0$$

$$P_c(S) \approx A(1-S)^{0.6}$$



$$k_a(S) \approx (1-S)^3$$

$$g(S) \approx P_c$$

$$h(S) \approx A(1-S)^{2.6}$$



En $S=1$

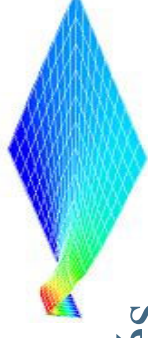
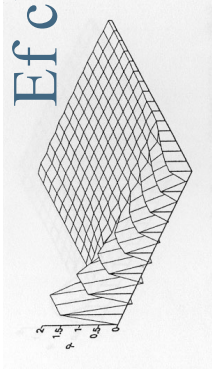
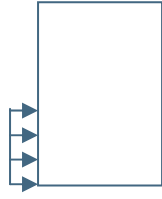
on obtient $\frac{\partial S}{\partial t} = 0$

Méthodes numériques pour l'écoulement et la méca : discrétisation spatiale

➤ Les objectifs

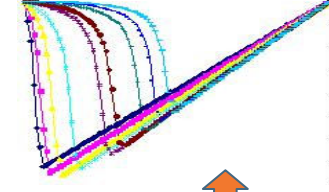
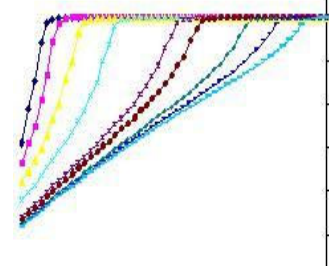
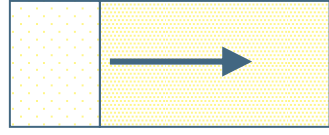
- ✓ Une méthode stable et monotone pour les écoulements
 - ✓ Compatible avec une méthode éléments finis pour la mécanique
- Méthode 1 : hydro et méca EF P2/P1 points d'intégration = sommets

- OK sur test de consolidation



Ef lumpés

- OK sur test de désaturation (Liakopoulos)



Méthodes numériques pour l'écoulement et la méca : discrétisation spatiale

➤ Limitations et remèdes des EF

- ✓ Perte de précision en mécanique -> intégration sélective
- ✓ Instabilités sur des problèmes de type injection de gaz -> VF écoulement

➤ La Méthode CFV/DM(control finite volume/dual mesh)

▪ Objectif

- ✓ formulation VF compatible avec la structure informatique d'un code EF
- ✓ Se coupler facilement avec une formulation EF de mécanique

▪ Principe

- Disposer d'un maillage primal qui sera celui de EF méca
- Construire autour des nœuds du maillage primal un volume de contrôle dual
- Exprimer le bilan en parcourant les éléments du maillage primal

La méthode CFM/DM (control finite volume/dual mesh)

▪Équation modèle
$$\frac{\partial m(u)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(u) ; \mathbf{F} = k(u) \nabla u$$

▪Bilan sur le volume de contrôle:

$$A_K \frac{m_K^{n+1} - m_K^n}{\Delta t} + \sum_L T_{KL} k(u_{KL}^{n+1}) (u_L^{n+1} - u_K^{n+1}) = 0$$

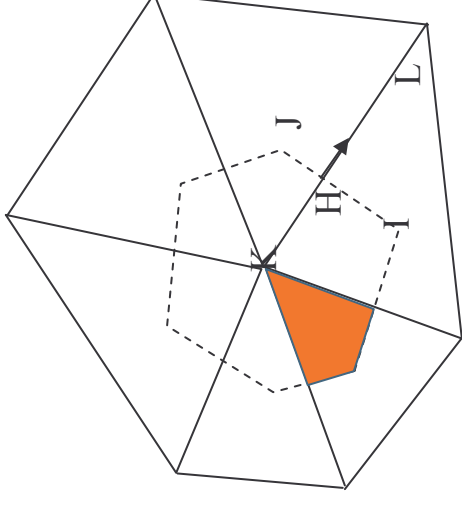
▪Décentrage

$$\text{si } u_L^{n+1} > u_K^{n+1} \quad u_{KL}^{n+1} = u_L^{n+1}$$

▪Boucle sur les éléments

$$\sum_{e \in \mathbb{T}_K} A_K^e \frac{m_{K,e}^{n+1} - m_{K,p,e}^n}{\Delta t} + \sum_e \sum_{L \in e \neq K} T_{KL}^e k(u_{KL}^{n+1}) (u_L^{n+1} - u_K^{n+1}) = 0$$

$$T_{KL}^e = \frac{d_{I,H}}{d_{K,L}} = - \int_{\mathcal{E}} \nabla \lambda_K \cdot \nabla \lambda_K$$

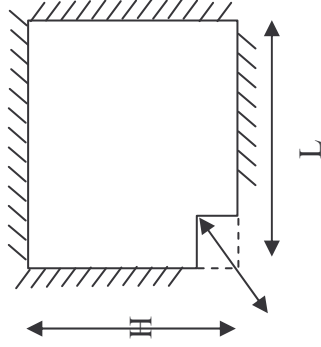


La méthode CFM/DM (control finite volume/dual mesh)

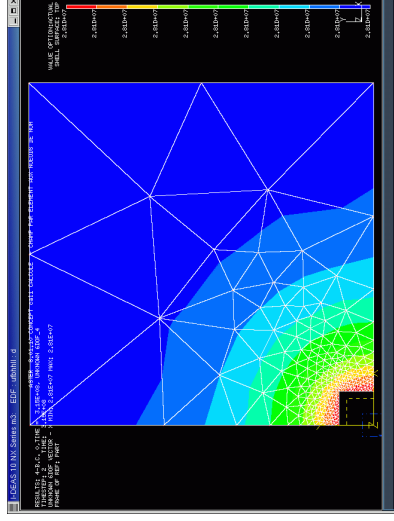
▪Prédiction théorique :

- ✓ Schémas stable, convergent et monotone pour les maillages Delaunay

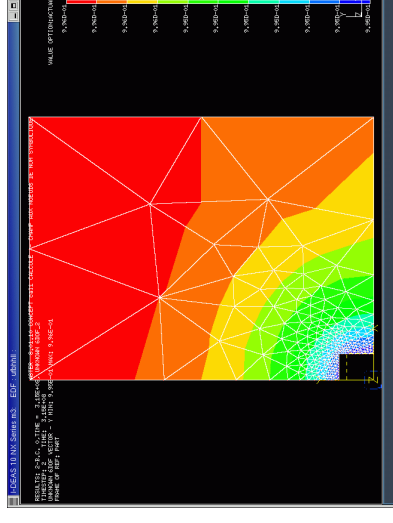
▪Exemple d'application



Injection gaz



Pg 10 ans $H/L=1$



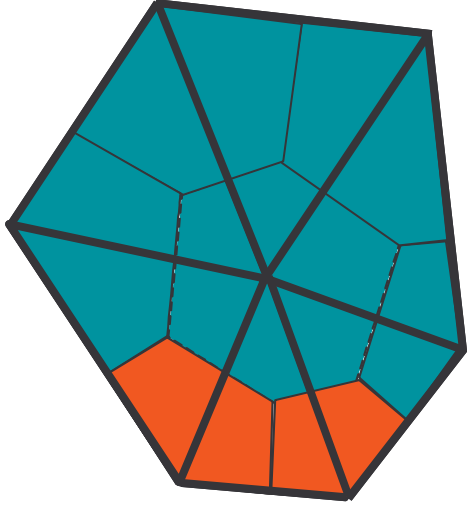
S 10 ans $H/L=4/3$

- Aucune convergence en élargissant le maillage plus que $H/L=4/3$

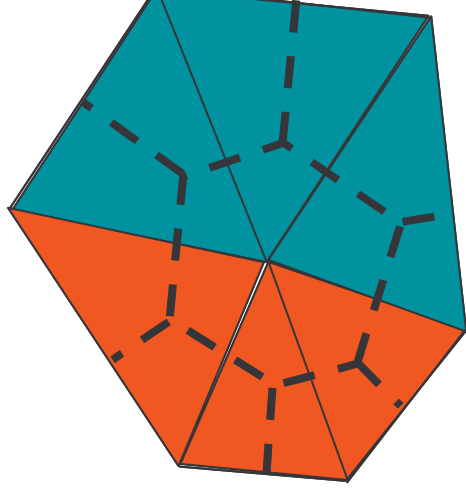
La méthode CFM/DM (control finite volume/dual mesh)

■ Remarque sur les interfaces

- ✓ A l'interface de matériaux ayant des propriétés différentes (p.ex. les courbes $P_c(S)$) certaines quantités (p.ex. les pressions capillaires) peuvent avoir des discontinuités.
- ✓ Il est alors essentiel que les propriétés soient constantes sur les volumes de contrôle et non pas sur les mailles du maillage primal.



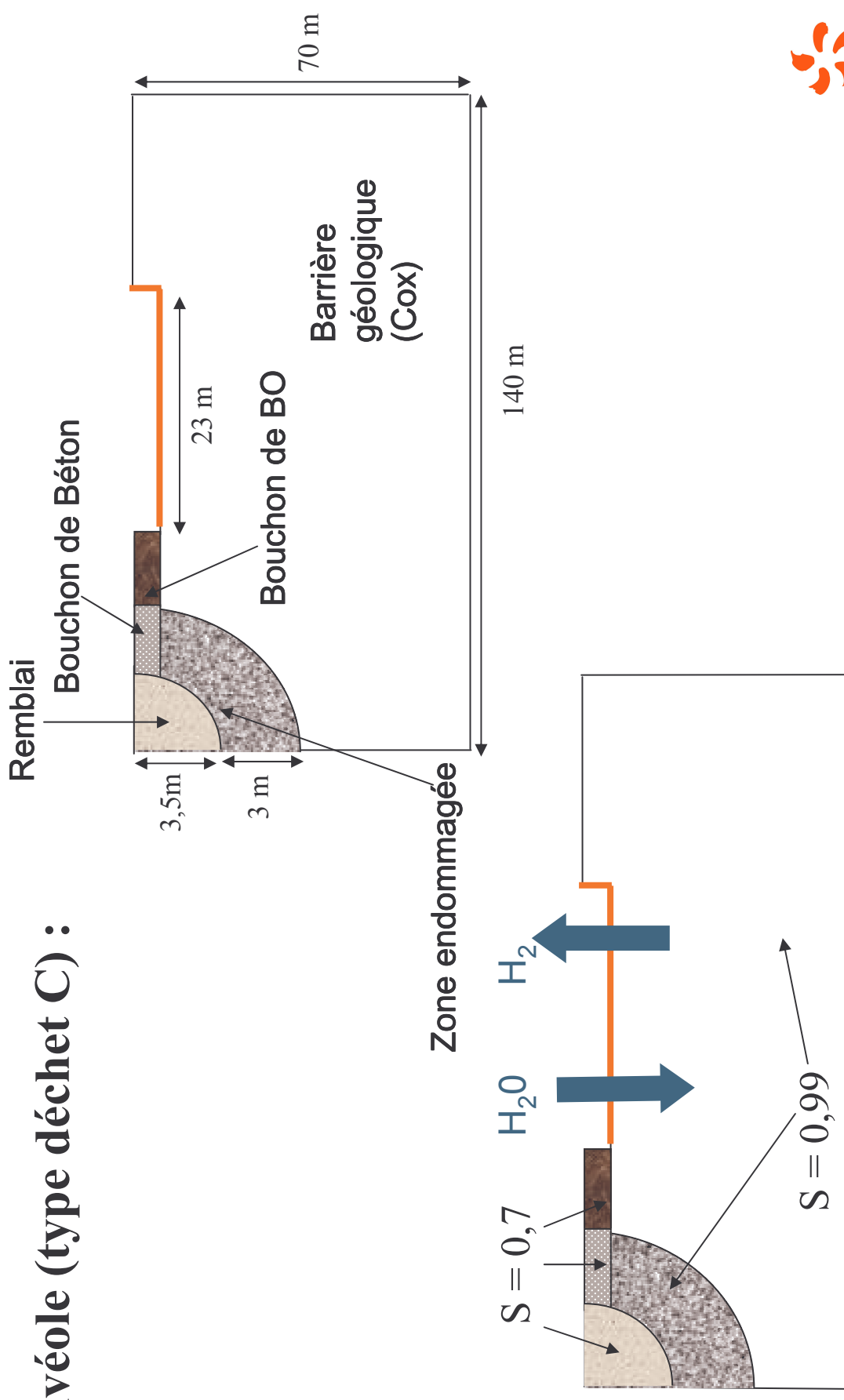
Bon



Mauvais

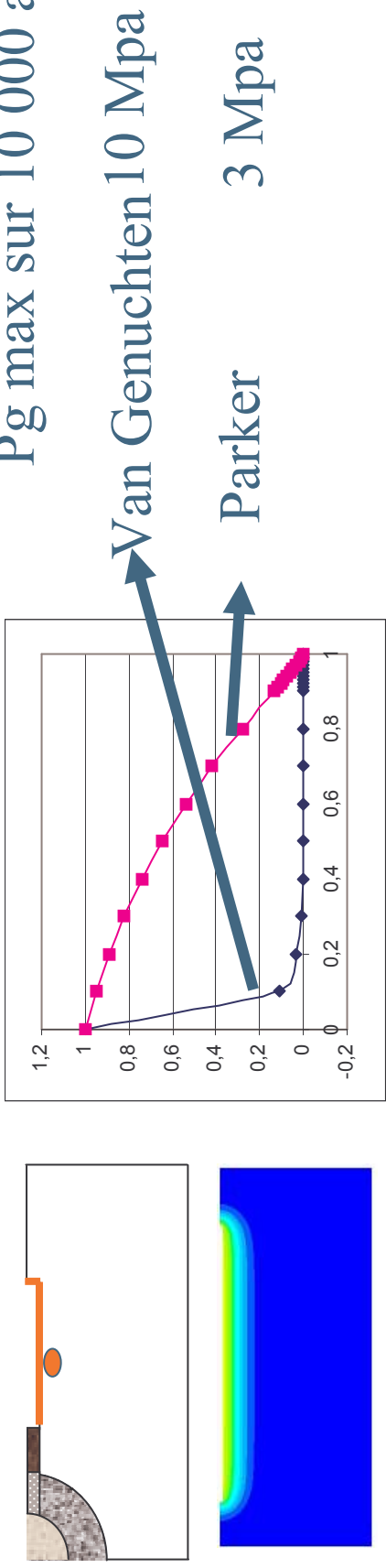
Étude de la migration des gaz de corrosion(1/3)

Alvéole (type déchet C) :



Étude de la migration des gaz de corrosion (2/3)

- Effet de la perméabilité relative sur la pression de gaz
 $X = 25 \text{ m}$
 $P_g \text{ max sur } 10\ 000 \text{ ans}$

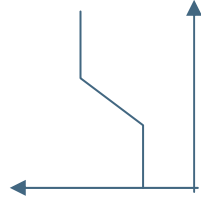


- Effet des jeux sur l'état de contrainte

	Sig rr	Sig $\theta\theta$
Sans jeux	2 Mpa	
Avec jeux	4 Mpa	8 Mpa

Étude de la migration des gaz de corrosion (3/3)

➤ Rôle du couplage corrosion/saturation

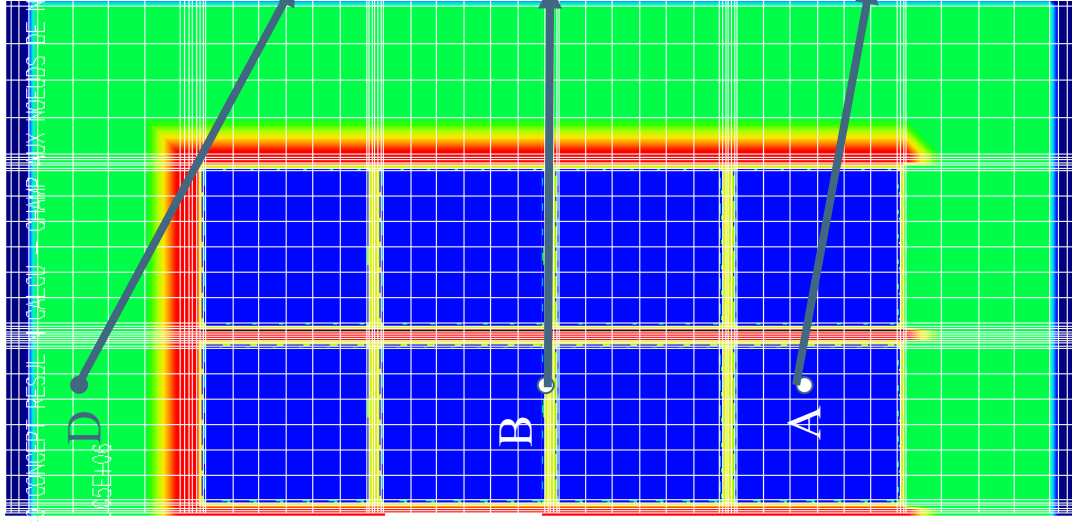
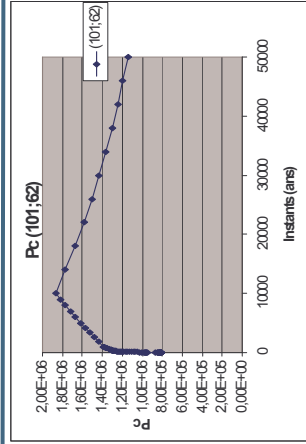
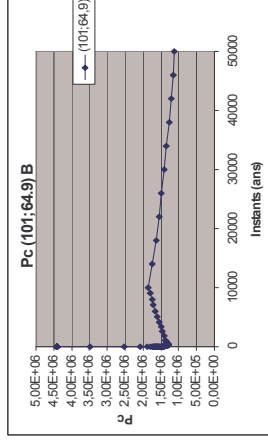
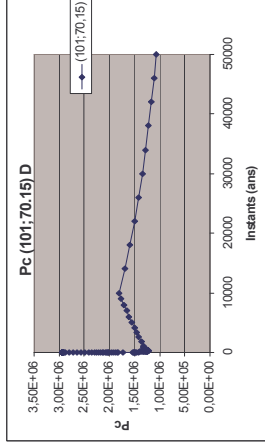
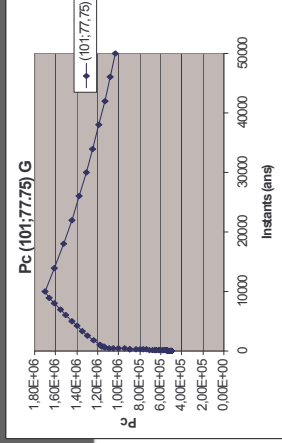


Vitesse de corrosion	Temps	Pression gaz	Épaisseur corrodée
Constante	1000 ans	18Mpa	1 mm
Dépendant de Saturation	5000 ans	9.3Mpa	1mm

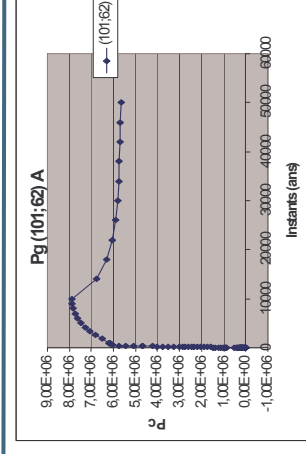
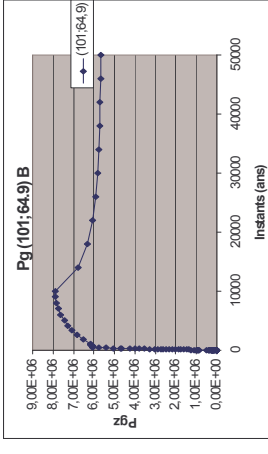
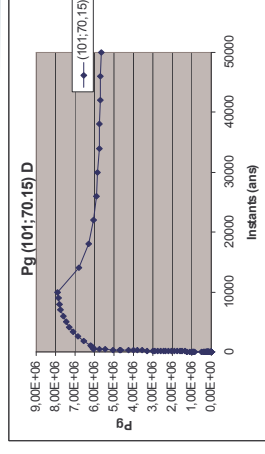
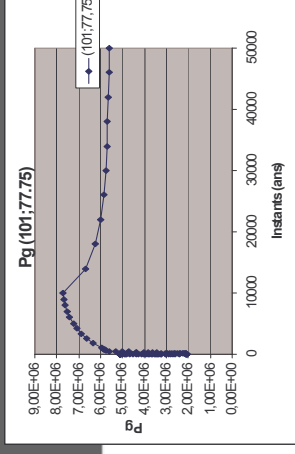
➔ **Rôle de la cinétique : pour un même degré de corrosion, le fait de l'atteindre plus lentement est favorable**

Couplex gaz (1/2)

Pc



Pgaz



COX

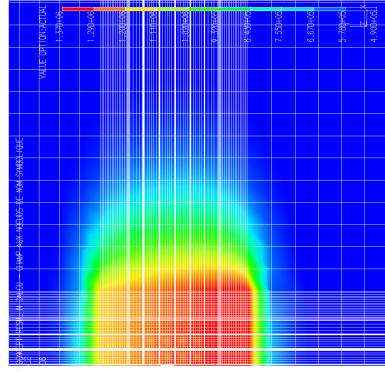
Béton de remplissage

Béton de colis

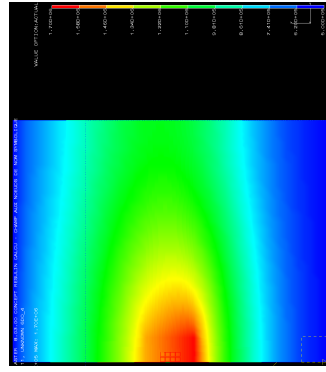
Colis



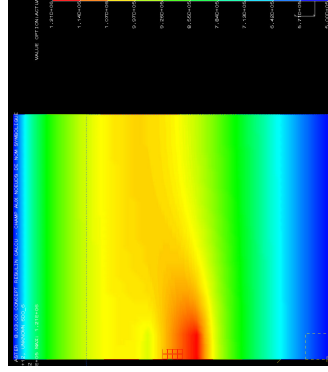
Couplex gaz (2/2)



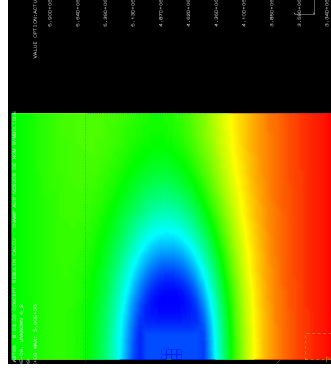
240 ans



5 000 ans

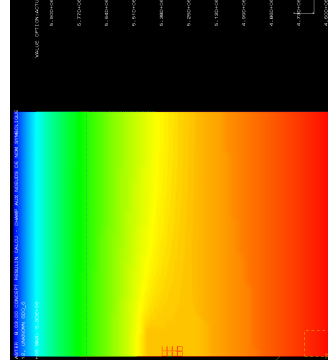
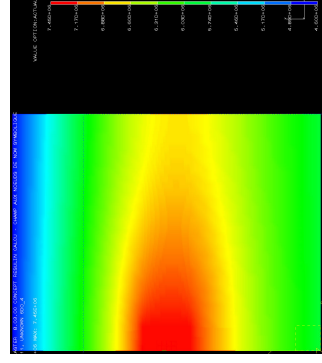


50 000 ans



Pc

Pgaz



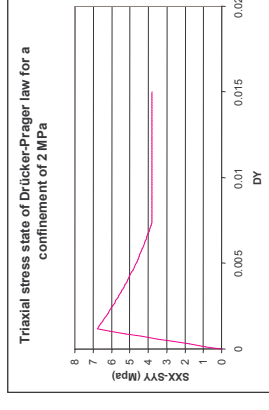
Résultats du benchmark MoMas sur les simulations hydro-mécanique (1/3)

➤ Objectifs généraux

- ✓ Sur des cas où toutes les équations sont fixées
- ✓ Comparer des solutions obtenues par différentes équipes
- ✓ Utilisant plusieurs codes
- ✓ Avec des méthodes numériques différentes

➤ Principales caractéristiques

- ✓ Couplages hydro-mécanique
- ✓ Loi de comportement mécanique adoucissante
- ✓ Perméabilité variable avec endommagement (4 ordres de grandeur)
- Excavation d'une galerie circulaire sans soutènement avec un état de contrainte initial anisotrope



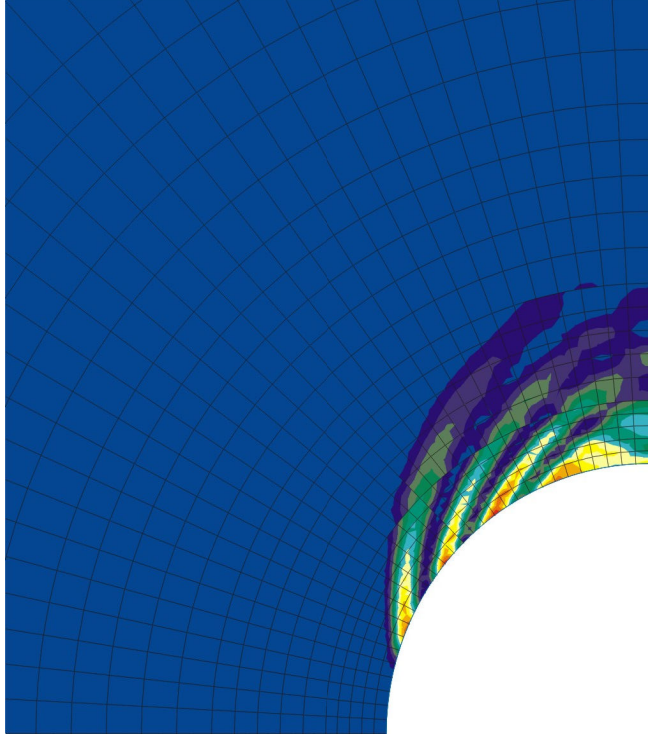
Bench mark Momas (2/3)

- **Les résultats concordants :**
 - ✓ Tous les cas 1D Les cas 2D en plasticité parfaite
- **Les cas avec comportement adoucissant ont de gros écarts**

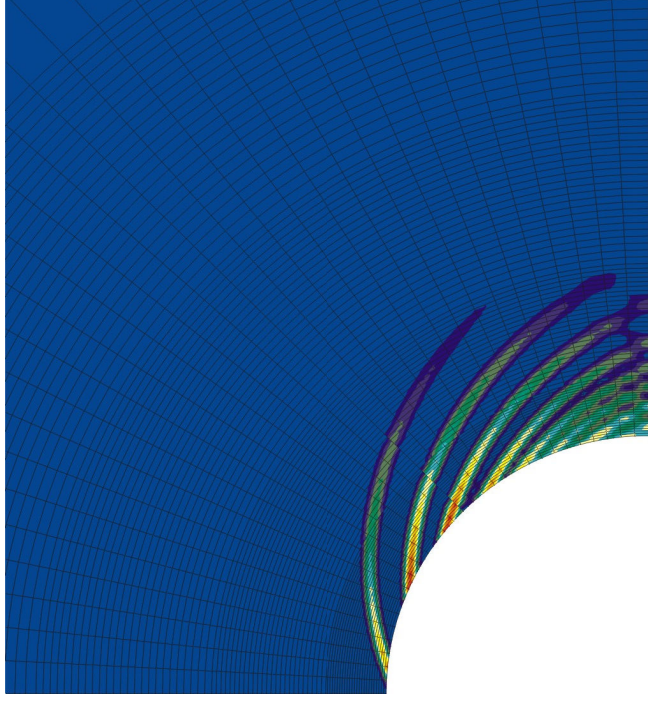
Hydro	CAL hydro	Perméabilité	Contrainte résiduelle σ_{res}	Ecart			Commentaires
				U	Peau	Def Plast	
Insat	Peau	Variable	0,5 Mpa	15 %	30%	46%	Résultats de 4 équipes
Saturé	Peau	Cste	0	15 %	67%	100% / 900%	5 équipes Maillages différents
Saturé	Suintement	Variable	0,5 Mpa	11 %	130 %	65%	3 équipes 2 ont mêmes résultats

Benchmark Momas : dépendance au maillage (3/3)

*Bandes de cisaillement
(conditions hydrauliques de suintement)*



Maillage grossier



Maillage fin

Conclusions

- Les couplages jouent un rôle essentiel sur les prédictions de l'évolution des sites de stockage
- Des difficultés spécifiques aux écoulements biphases et celles liées au comportement mécanique fragile sont susceptibles de se rencontrer conjointement
- Une méthode type VF décentrés doit cohabiter avec une méthode EF pour la mécanique
- Des méthodes de régularisation de la mécanique doivent être développées dans un cadre couplé.