Algorithmes pour la simulation numérique des écoulements eau-gaz dans des sites de stockages des déchets radioactifs

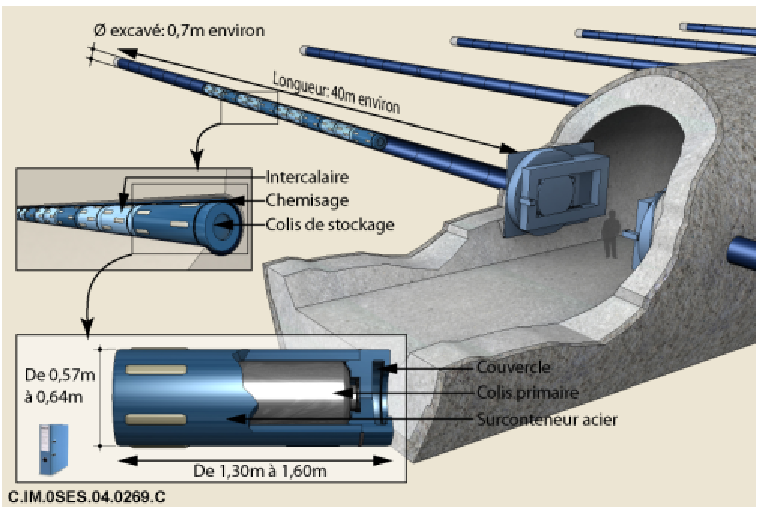
Cédric Galusinski, Mazen Saad

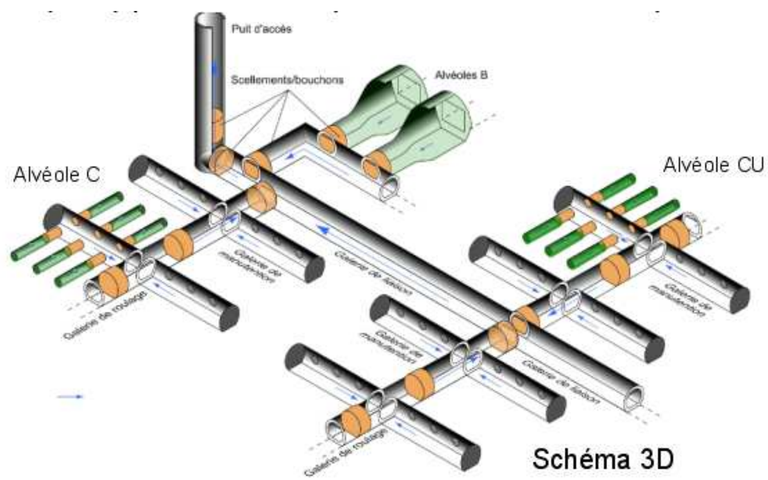
Université de Toulon, Ecole centrale de Nantes.

Transfert de gaz dans un site de déchets radioactifs

Production d’hydrogène par corrosion des matériaux métaliques (colis de stockage, surconteneurs ....)

Modèle biphasique à 2 consituants: Mélange gazeux : Hydrogène + vapeur d’eau





Modélisation

conservation de la masse eau:

$$\phi(x)\partial_t s_w(t,x) + \mathrm{div}(\mathbf{V}_w)(t,x) = Q^w/\rho_w$$

conservation de la masse gaz:

$$\phi(x)\partial_t(\rho_g s_g)(t,x) + \mathrm{div}(\rho_g \mathbf{V}_g)(t,x) = Q^g(t,x),$$

Loi de Darcy pour les vitesses

$$\mathbf{V}_w = -\mathbf{K}(x)\frac{k_r^w(s_w)}{\mu_w}\nabla p_w, \quad \mathbf{V}_g = -\mathbf{K}(x)\frac{k_r^g(s_g)}{\mu_g}\nabla p_g,$$

les saturations:

$$s_w + s_g = 1.$$

Densité et pression capillaire

$$\rho_g = \rho_g(p_g)$$

$$p_w - p_g = p_c(s_w).$$

Algorithme global

On écrit

$$\mathbf{V}_w = k_r^w(s_w)\nabla\theta_w, \qquad \nabla\theta_w = -\mathbf{K}(x)\frac{1}{\mu_w}\nabla p_w$$

$$\mathbf{V}_g = k_r^g(s_g)\nabla\theta_g, \qquad \nabla\theta_g = -\mathbf{K}(x)\frac{1}{\mu_g}\nabla p_g$$

conservation de la masse eau

$$\phi(x)\partial_t S_w(t,x) + \partial_x\left(k_r^w(s_w)\partial_x\theta_w\right) + \partial_y\left(k_r^w(s_w)\partial_y\theta_w\right) = Q^w/\rho_w$$

conservation de la masse gaz:

$$\phi(x)\partial_t(\rho_g s_g) + \partial_x\left(\rho_g k_r^g(s_g)\partial_x\theta_g\right) + \partial_y\left(\rho_g k_r^g(s_g)\partial_y\theta_g\right) = Q^g(t,x),$$

Les variables conservatives sont : $U = (s_w, \rho_g s_g) = (s_w, u)$, le système s'écrit

$$\phi\partial_t U + \partial_x F(\partial_x\theta, U) + \partial_y F(\partial_y\theta, U) = Q$$

avec

$$F(\theta, U) = \begin{pmatrix} \theta_w\, k_r^w(s_w) \\ \theta_g\, \frac{k_r^g(s_g)}{s_g}\rho_g s_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_w\, k_r^w(s_w) \\ \theta_g\, h(s_w)u \end{pmatrix}$$

Algorithme global

Schéma en dimension 1.
On intégre sur $]t_n, t_{n+1}[\times]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[$:

$$\phi_i \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{dt} + \frac{F_{i+1/2}^{n,n+1} - F_{i-1/2}^{n,n+1}}{dx} = G_i^{n+1}$$

avec

$$F_{i+1/2}^{n,n+1} = Fonction(\theta_{i+1/2}^{n+1}, U_i^n, U_{i+1}^n)$$

Schéma implicite en pression et explicite en permeabilité.
Pour calculer les flux aux interfaces, on considère θ constante sur la maille $]x_i, x_{i+1}[$. Le schéma de Roe s'écrit

$$F_{i+1/2}^{n,n+1} = \frac{1}{2}\big(F(\theta_{i+1/2}^{n+1}, U_{i+1}^n) + F(\theta_{i+1/2}^{n+1}, U_i^n) - |A(\theta_{i+1/2}^{n+1}, U_i^n, U_{i+1}^n)|(U_{i+1}^n - U_i^n)\big)$$

avec A diagonalisable : $A = P\Lambda P^{-1}$. et

$$(\theta_w)_{i+1/2}^{n+1} = -\frac{k_{i+1/2}}{dx\mu_g}\big((p_g)_{i+1}^{n+1} - (p_g)_i^{n+1} + (p_c)_{i+1}^{n+1} - (p_c)_i^{n+1}\big)$$

Algorithme global

Construction de la matrice de Roe

$$F(\theta, U_r) - F(\theta, U_l) = A(\theta, U_r, V_l)(U_r - U_l) \qquad \text{(conservation)}$$

$$A(\theta, U, U) = F'(\theta, U) \qquad \text{(consistence)}$$

On a

$$F(\theta, U_r) - F(\theta, U_l) = \begin{pmatrix} \theta_w \left(k_r^w(S_r) - k_r^w(S_l)\right) \\ \theta_g \left(h(S_r)u_r - h(S_l)u_l\right) \end{pmatrix}$$

Ensuite

$$k_r^w(S_r) - k_r^w(S_l) = \frac{k_r^w(S_r) - k_r^w(S_l)}{S_r - S_l}(S_r - S_l) := a_{ww}(S_r, S_l)(S_r - S_l)$$

$$\begin{aligned} h(S_r)u_r - h(S_l)S_l \qquad &= \frac{u_r + u_l}{2} \frac{h(S_r) - h(S_l)}{S_r - S_l}(S_r - S_l) + \frac{h(S_r) + h(S_l)}{2}(u_r - u_l) \\ &= a_{gw}(S_r - S_l) + a_{gg}(u_r - u_l) \end{aligned}$$

Algorithme global

$$F(\theta,U_r)-F(\theta,U_l)=\begin{pmatrix}\theta_w a_{ww} & 0\\ \theta_g a_{gw} & \theta_g a_{gg}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_r-S_l\\ u_r-u_l\end{pmatrix}=A(\theta,U_r,U_l)(U_r-U_l)$$

avec $A(\theta,U_r,U_l)=A(\theta,U_l,U_r)$
$a_{ww}\geq 0$, $a_{gg}\geq 0$ et A est diagonalisable.

Modèle de Mualem–Van Genuchten. La fonction h est bien définie

$$h(S)=k_r^g(S)/(1-S)=(1-S^{1/m})^{2m}/\sqrt{1-S}$$

si $m\geq 1/4$. Perméabilités Couplex-Gaz ok.

Résumé :
* Méthode de Newton
* Monter en ordre en espace (facile)
* Couplage avec la méthode de Newton (moins facile).

Algorithme splitting

$$M_w = k_r^w(s_w)/\mu_w, \quad M_g(s_g) = k_r^g(s_g)/\mu_g$$

$$M = M_w + M_g \quad > 0$$

$$V_g = -KM_g\nabla P_g - \rho_g M_g g\nabla z$$

$$V_w = -KM_w\nabla P_g - KM_w\nabla P_c - \rho_w M_w g\nabla z$$

$$V_T = V_w + V_g = -KM\nabla P_g - KM_w\nabla P_c - K(\rho_w M_w + \rho_g M_g)g\nabla z$$

$$V_w = \nu_w V_T - KM\nu_w\nu_g\nabla P_c - KM\nu_w\nu_g(\rho_w - \rho_g)g\nabla z)$$

$$V_g = \nu_g V_T + KM\nu_w\nu_g\nabla P_c + KM\nu_w\nu_g(\rho_w - \rho_g)g\nabla z)$$

le système s'écrit :

$$\phi\partial_t s_w + \mathbf{V}_T \cdot \nabla\nu_w + \nu_w \,\mathrm{div}(\mathbf{V}_T) - \mathrm{div}(a(s_w)\nabla P_c) + \partial_z G = Q^w/\rho_w$$

$$\phi\partial_t(\rho_g s_g) + \mathbf{V}_T \cdot \nabla(\rho_g\nu_g) + \rho_g\nu_g \,\mathrm{div}(\mathbf{V}_T) + \mathrm{div}(\rho_g a(s_w)\nabla P_c) - \partial_z(\rho_g G) = Q^g$$

Splitting : Transport + diffusion

Algorithme splitting : transport

Etape Transport : approcher le système suivant

$$\phi \partial_t s_w + \mathbf{V}_T \cdot \nabla \nu_w + \partial_z G = 0$$

$$\phi \partial_t (\rho_g s_g) + \mathbf{V}_T \cdot \nabla (\rho_g \nu_g) - \partial_z (\rho_g G) = 0.$$

Soit encore

$$\phi \partial_t U + \mathbf{V}_T \cdot \nabla F(U) + \partial_z H(U) = 0$$

avec $U = (S_w, u := \rho_g S_g)$

$$F(\theta, U) = \begin{pmatrix} \nu_w(S_w) \\ \rho_g \nu_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu_w(S_w) \\ (\rho_g S_g) \frac{\nu_g}{S_g} := u h(S_w) \end{pmatrix}$$

avec h continue.

Les termes de gravité sont plus lourds à écrire, et il faut que k_r^g / S_g^2 soit continue .

$$F'(U) = \begin{pmatrix} \nu_w'(S_w) & 0 \\ u h'(S_w) & h(S_w) \end{pmatrix}$$

$F'(U)$ est diagonalisable et ses valeurs propres sont positives.

$H'(U)$ est une matrice pleine.

Algorithme splitting : transport

La matrice de Roe associée à $F'(U)$ est obtenue de la même manière que précédemment.
(diagonalisable et ses v.p. sont positives)

* Schéma explicite d'ordre 1 (sans gravité) : c'est le schéma UPWIND

$$\frac{(S_w)_i^{n+1}-(S_w)_i^n}{dt}+(u_T)^+_{i-1/2}\frac{(\nu_w)_i^n-(\nu_w)_{i-1}^n)}{dx}+(u_T)^-_{i+1/2}\frac{(\nu_w)_{i+1}^n-(\nu_w)_i^n}{dx}+...=0$$

$$\frac{(\rho_g S_g)_i^{n+1}-(\rho_g S_g)_i^n}{dt}+(u_T)^+_{i-1/2}\frac{(\rho_g\nu_g)_i^n-(\rho_g\nu_g)_{i-1}^n}{dx}+(u_T)^-_{i+1/2}\frac{(\rho_g\nu_g)_{i+1}^n-(\rho_g\nu_g)_i^n}{dx}+$$

Monter en ordre :

* schéma de Harten :

Algorithme splitting : diffusion

Les variables sont (Pc, P_g) .
Implicite en P_g et semi-implicite en Pc .

$$\frac{S_w((P_c)_i^{n+1}) - (S_w)_i^n}{dt} + (\nu_w)_i^n \big(\operatorname{div} V_T\big)_i^{n,n+1} - \big(\operatorname{div}(a((S_w)^n)\nabla(Pc)^{n+1})\big)_i = (Q_w)_i^{n+1}/\rho_w$$

$$\frac{(\rho_g)_i^{n+1} S_g((P_c)_i^{n+1}) - (\rho_g S_g)_i^n}{dt} + (\rho_g)_i^{n+1}(\nu_g)_i^n \big(\operatorname{div} V_T\big)_i^{n,n+1} - \big(\operatorname{div}((\rho_g)^{n+1} a((S_w)^n)\nabla(Pc)^{n+1})\big)_i = (Q_g)_i^{n+1}$$

avec

$$\big(\operatorname{div} V_T\big)_i^{n,n+1} = -\Big(\operatorname{div}\big(KM((S_w)^n)\nabla(P_g)^{n+1} - KM_w((S_w)^n)\nabla(P_c)^{n+1} + G((S_w)^n, (P_g)^{n+1})\nabla z\big)\Big)_i$$

Différences finies en espace.

Algorithme splitting : diffusion

Equation de la pression. EAU $\times$ $(\rho_g)_i^{n+1}$ + GAZ

$$(S_g)_i^n \frac{(\rho_g)_i^{n+1} - (\rho_g)_i^n}{dt} + (\rho_g)_i^{n+1} \big(\operatorname{div} V_T \big)_i^{n,n+1} + terme\, capillaire$$

Méthode de Newton pour résoudre le système non linéaire en P_c, P_g .

Augmenter l'ordre en temps. Méthode de splitting de Strang :

$$U^{k,n+1} = \mathcal{L}_1 \left(\frac{\Delta t}{2}, \mathcal{S}_L \big(\Delta t, \mathcal{L}_1 (\frac{\Delta t}{2}, U^{k,n}) \big) \right) ,$$

$\mathcal{L}_1$: schéma approchant la partie transport
$\mathcal{L}_2$: schéma approchant la partie diffusion.

Algorithme splitting : gravité

Les termes de gravité sont traités deux fois : transport + diffusion
On peut traiter la gravité dans la partie transport uniquement.

$$V_g = -KM_g \nabla P_g - \rho_g M_g g \nabla z$$
$$V_w = -KM_w \nabla P_g - KM_w \nabla P_c - \rho_w M_w g \nabla z$$

$$W_T = -KM \nabla P_g - KM_w \nabla P_c$$
$$V_w = \nu_w W_T - KM \nu_w \nu_g \nabla P_c - \rho_w M_w g \nabla z$$
$$V_g = \nu_g W_T + KM \nu_w \nu_g \nabla P_c - \rho_g M_g g \nabla z$$

Partie transport :

$$\phi \partial_t s_w + \mathbf{W}_T \cdot \nabla \nu_w - \partial_z(\rho_w M_w g) = 0$$
$$\phi \partial_t(\rho_g s_g) + \mathbf{W}_T \cdot \nabla(\rho_g \nu_g) - \partial_z((\rho_g)^2 M_g g) = 0.$$

Algorithme splitting : gravité

soit encore

$$\phi\partial_t U + \mathbf{W}_T \cdot \nabla F(U) + \partial_z H(U) = 0$$

avec $U = (S_w, u := \rho_g S_g)$

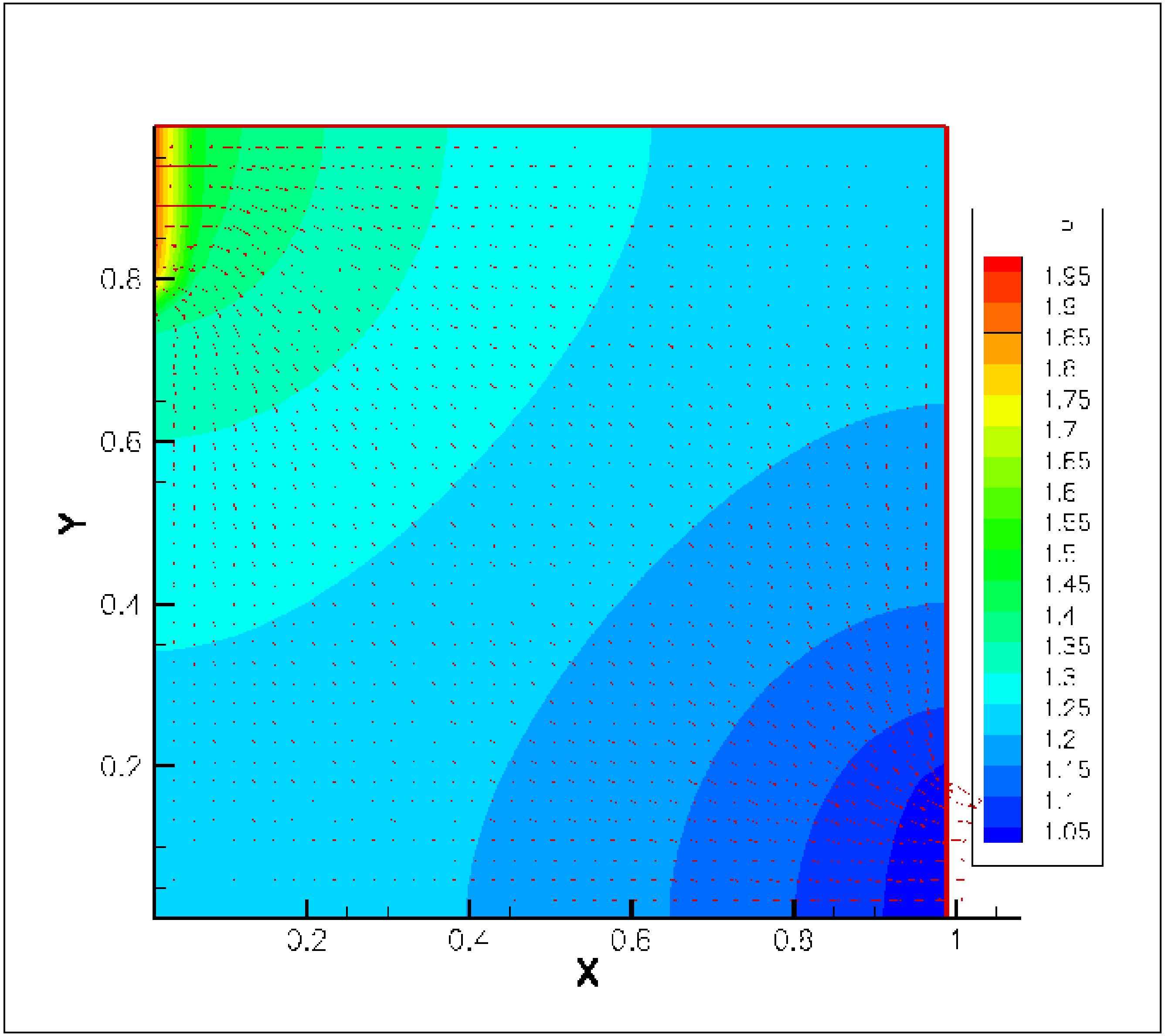
$$F(U) = \begin{pmatrix} \nu_w(S_w) \\ \rho_g \nu_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu_w(S_w) \\ uh(S_w) \end{pmatrix}$$

ici $\rho_g \nu_g = (\rho_g S_g)\frac{\nu_g}{S_g} := uh(S_w)$ avec h continue.

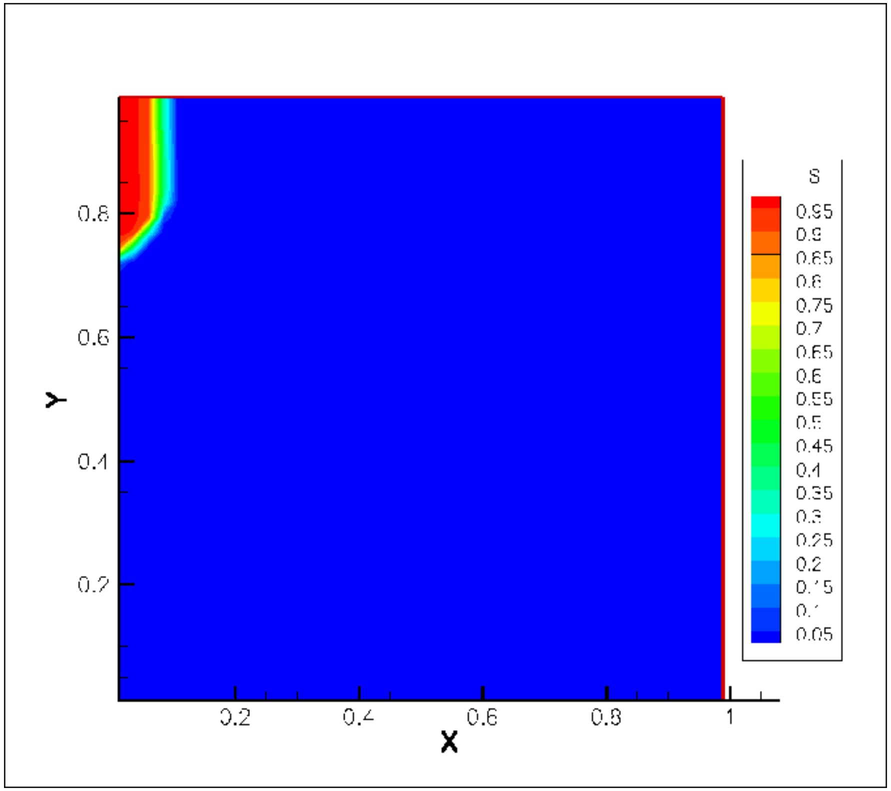
$$H(U) = g \begin{pmatrix} \rho_w M_w \\ (\rho_g)^2 M_g \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} \rho_w M_w \\ u^2 \frac{M_g}{S_g^2} \end{pmatrix}$$

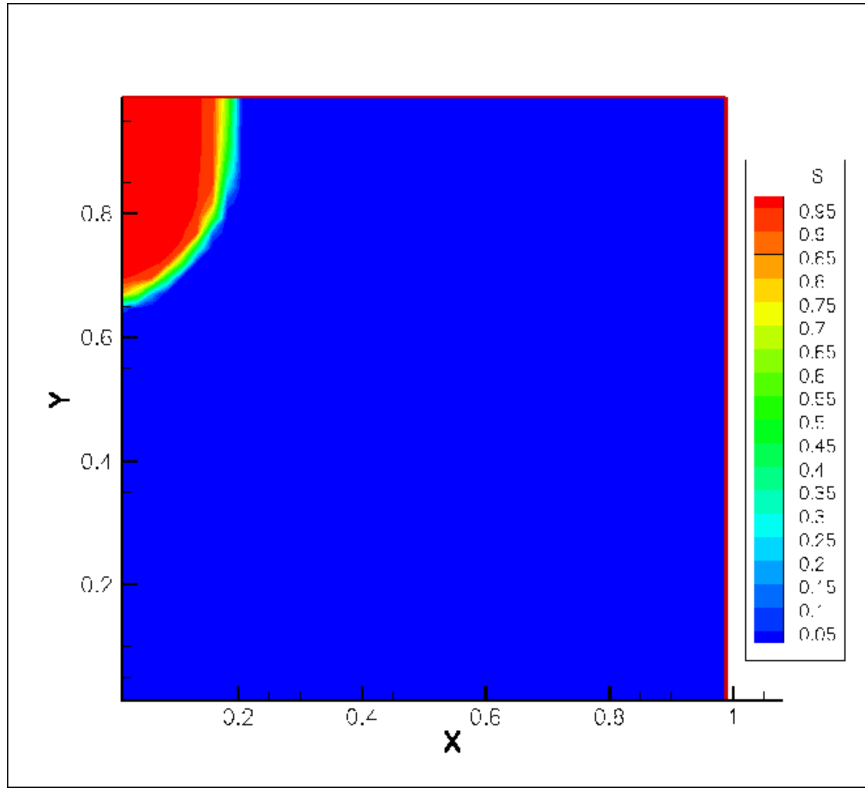
$$H'(U) = g \begin{pmatrix} \rho_w M'_w(S_w) & 0 \\ X & 2u\frac{M_g}{S_g^2} \end{pmatrix}$$

Un cas test : Incompressible

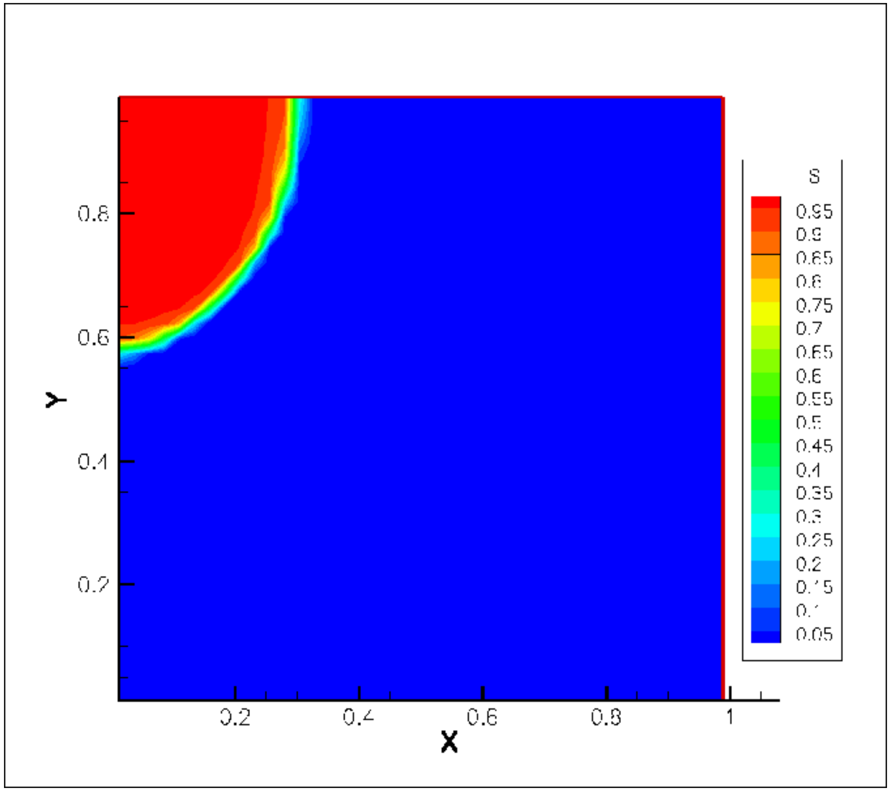


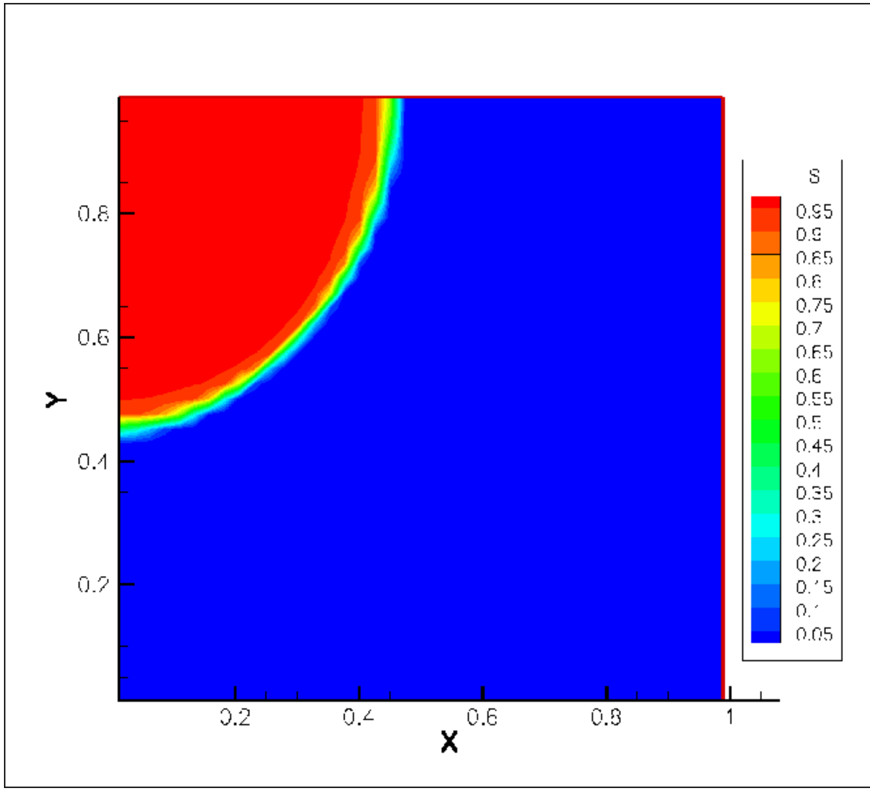
Un cas test : Incompressible



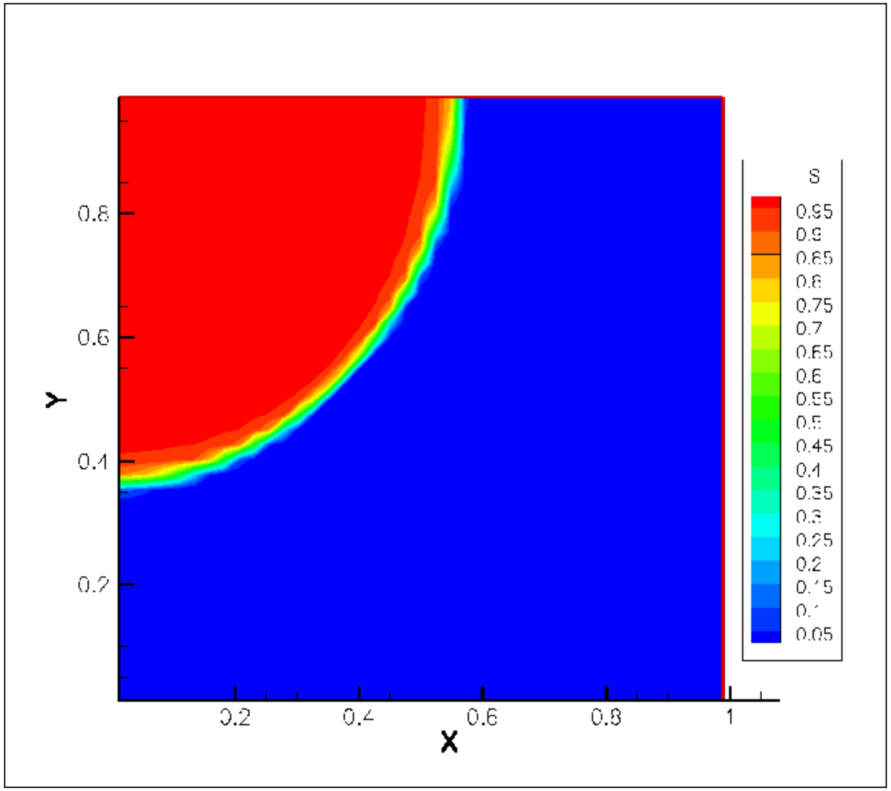


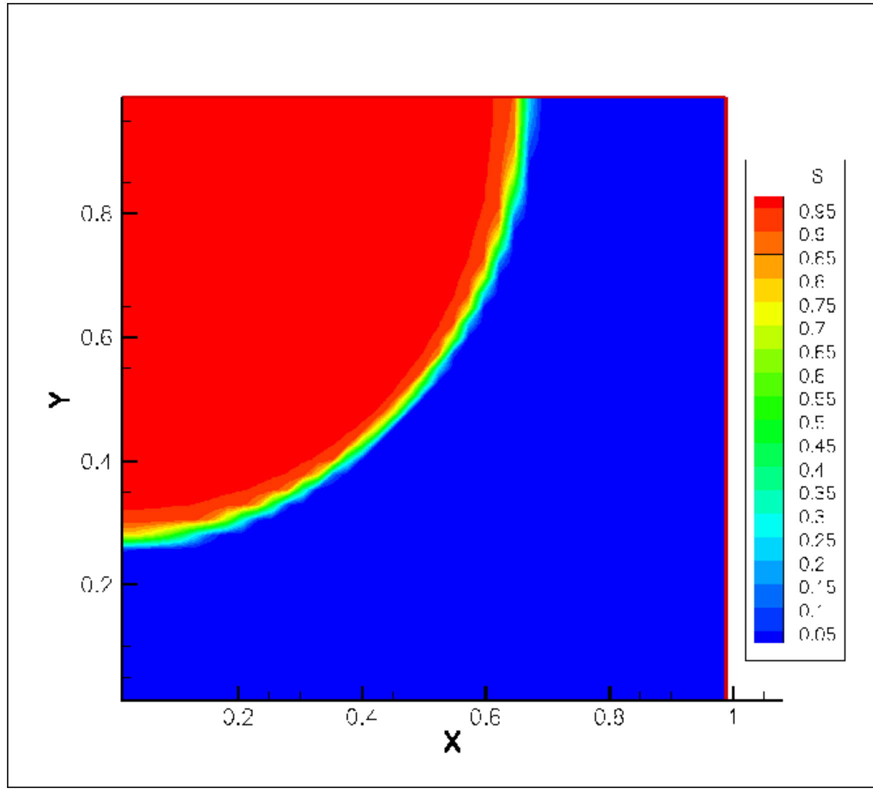
Un cas test : Incompressible



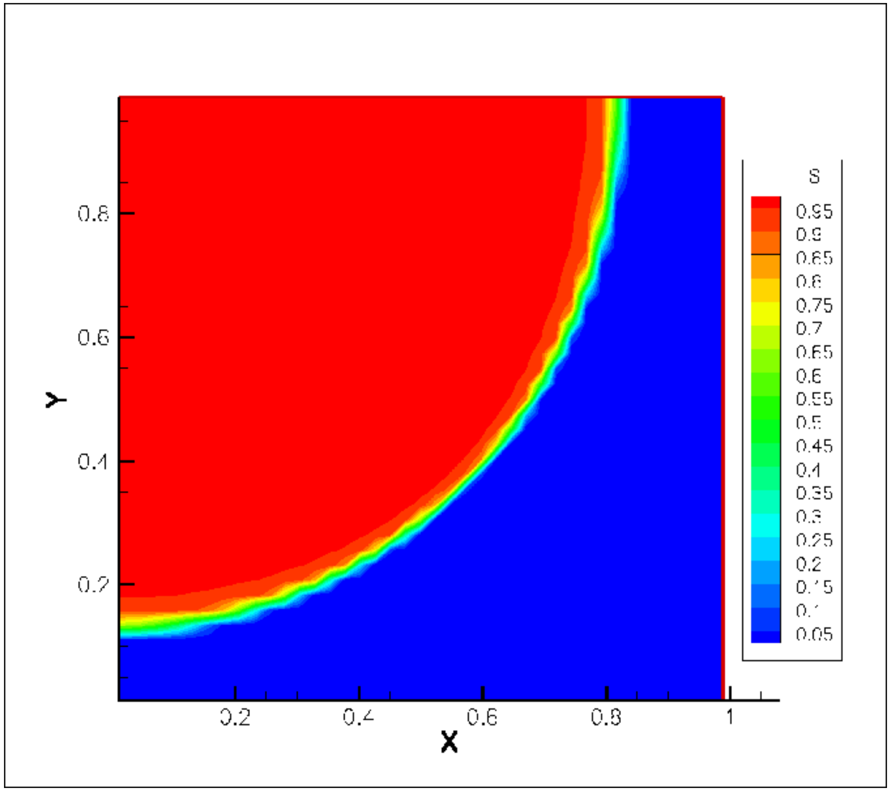


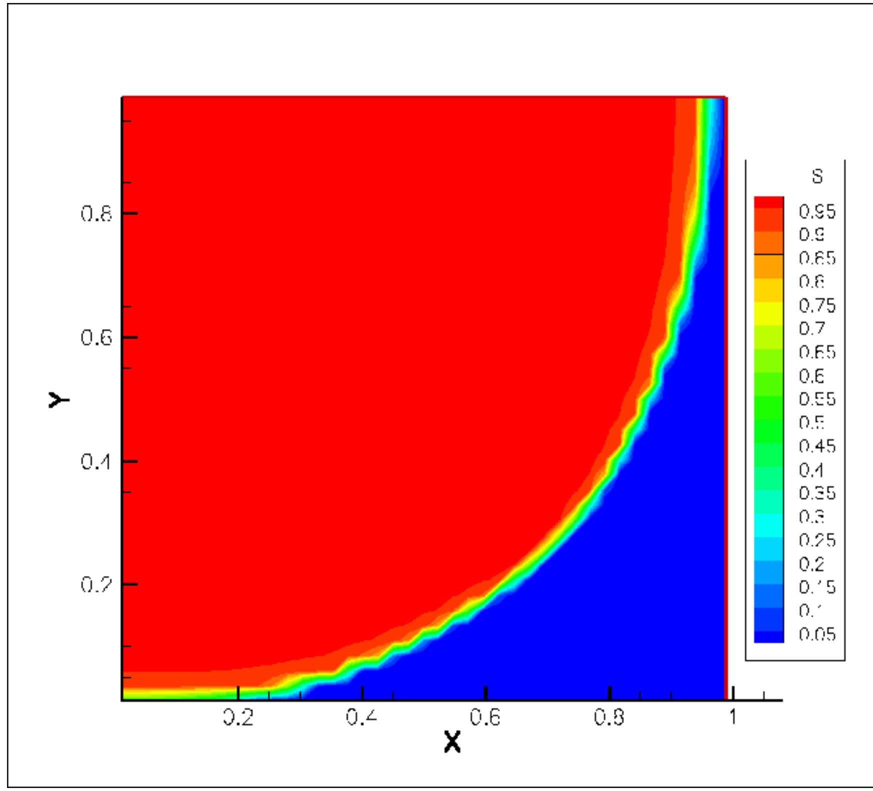
Un cas test : Incompressible



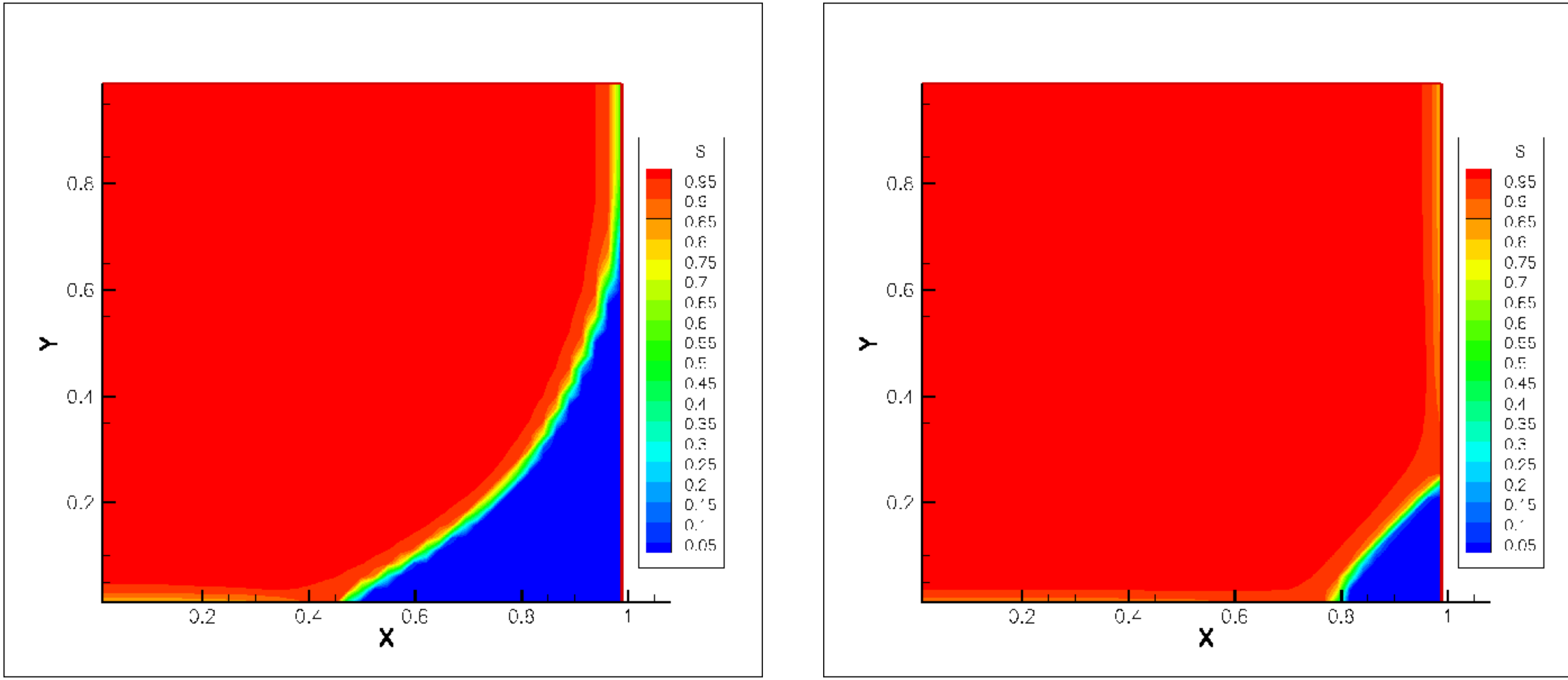


Un cas test : Incompressible

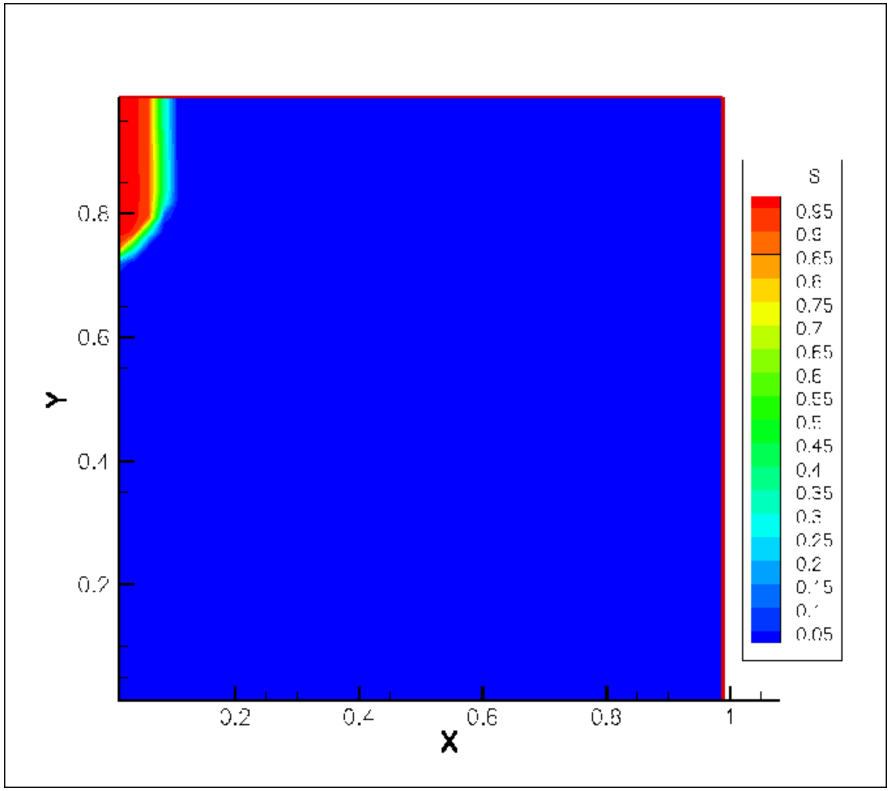


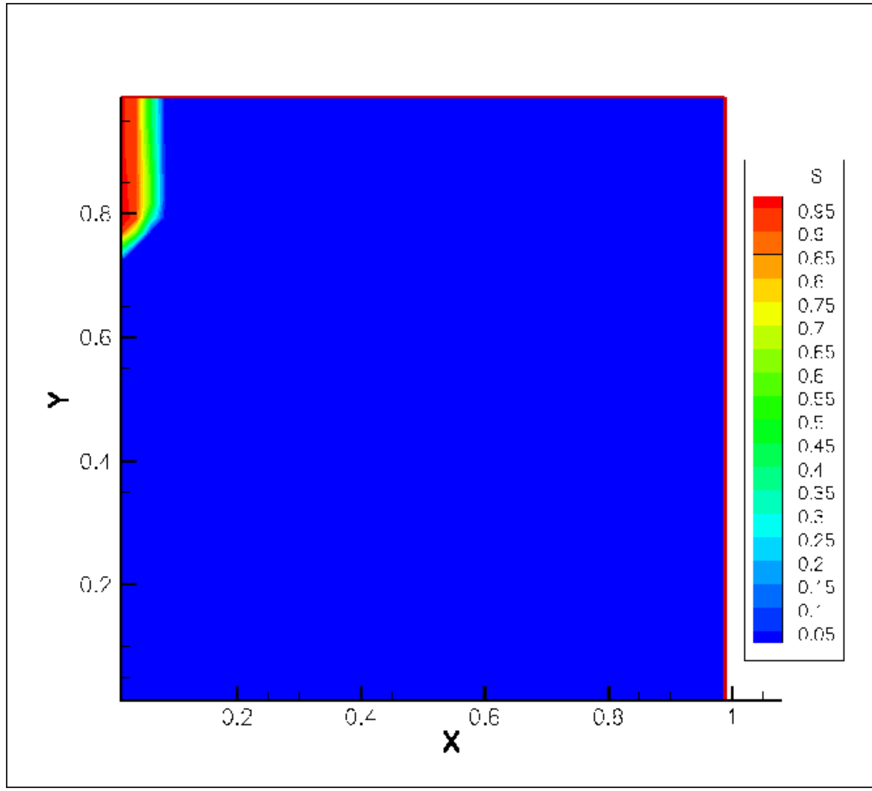


Un cas test : Incompressible

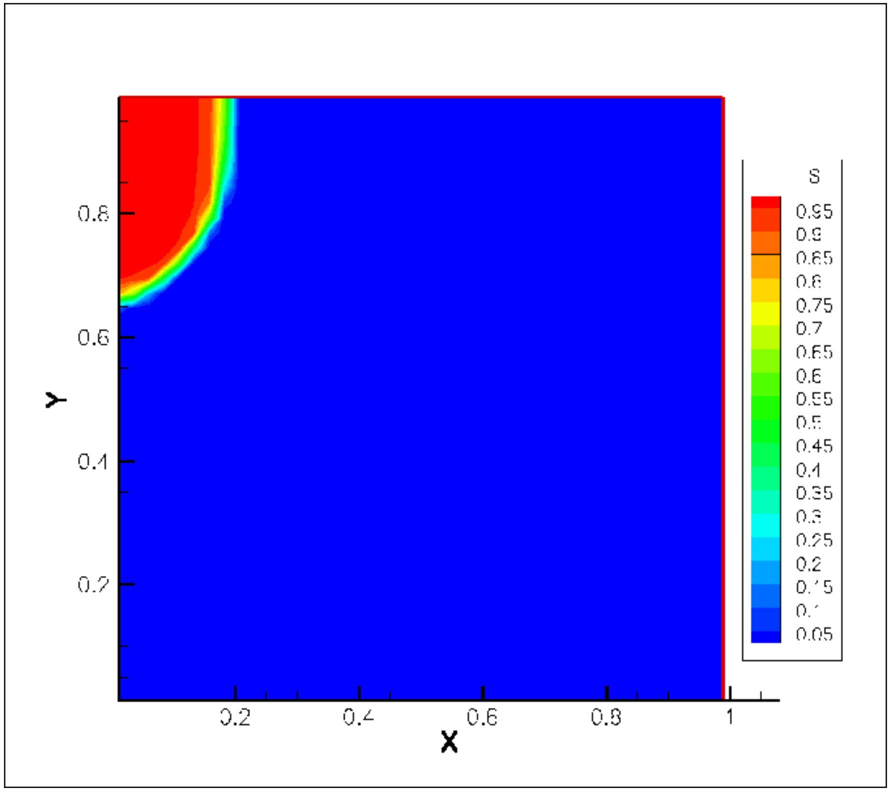


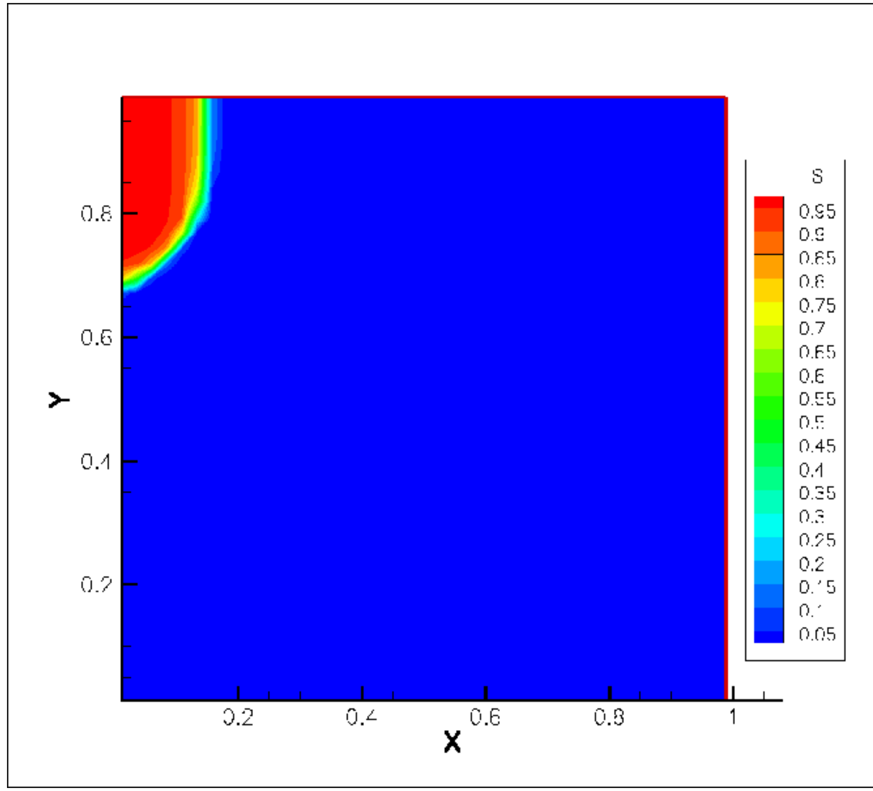
Un cas test : Incompressible/compressible



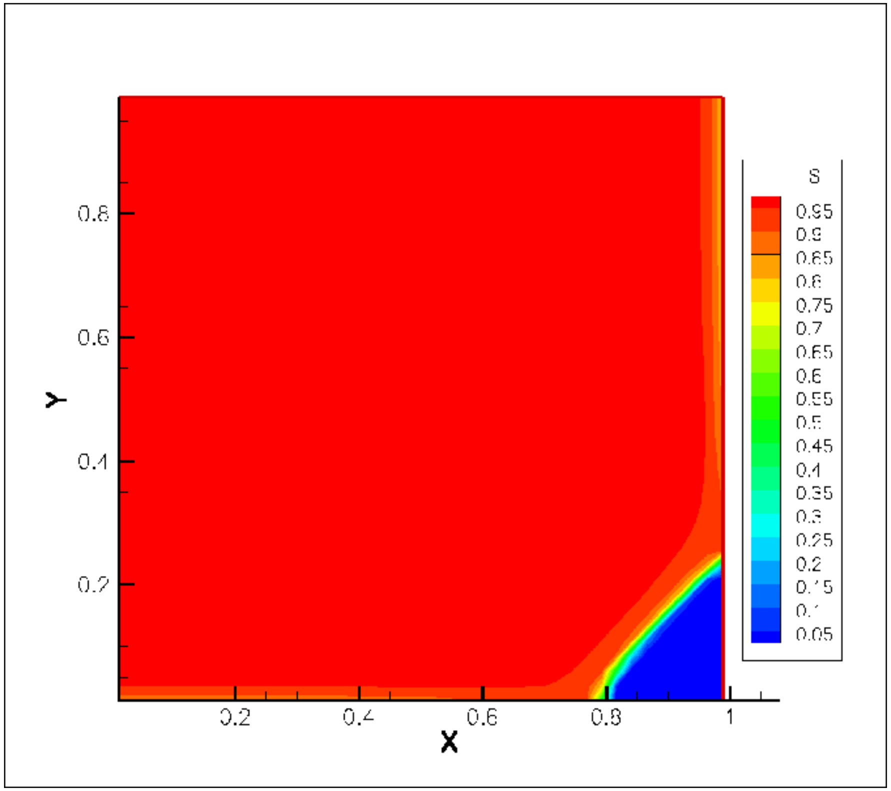


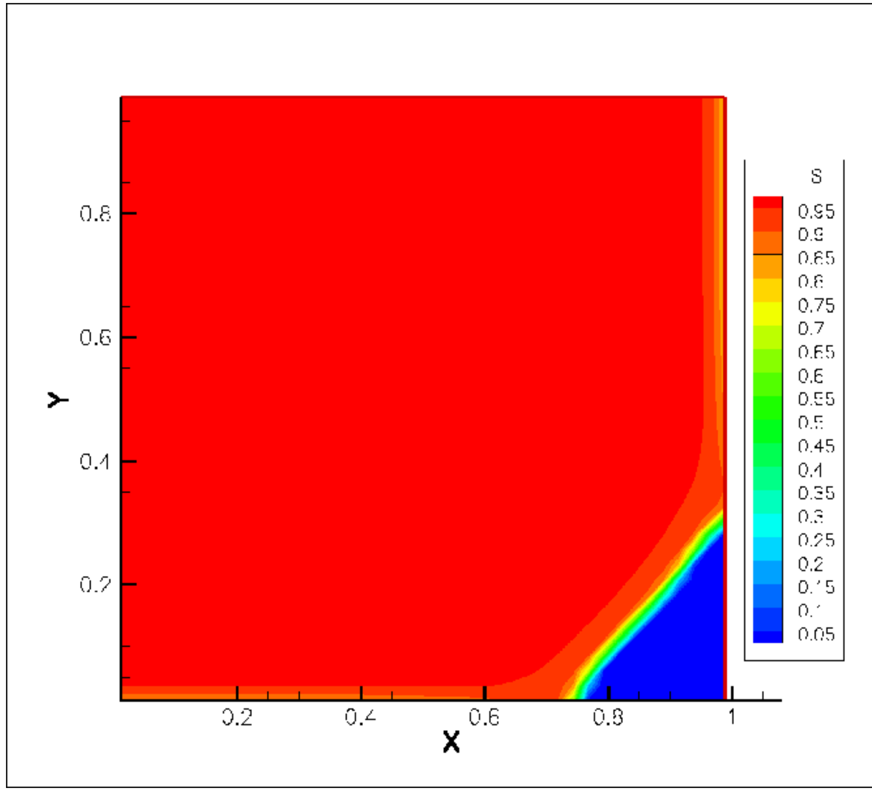
Un cas test : Incompressible/compressible



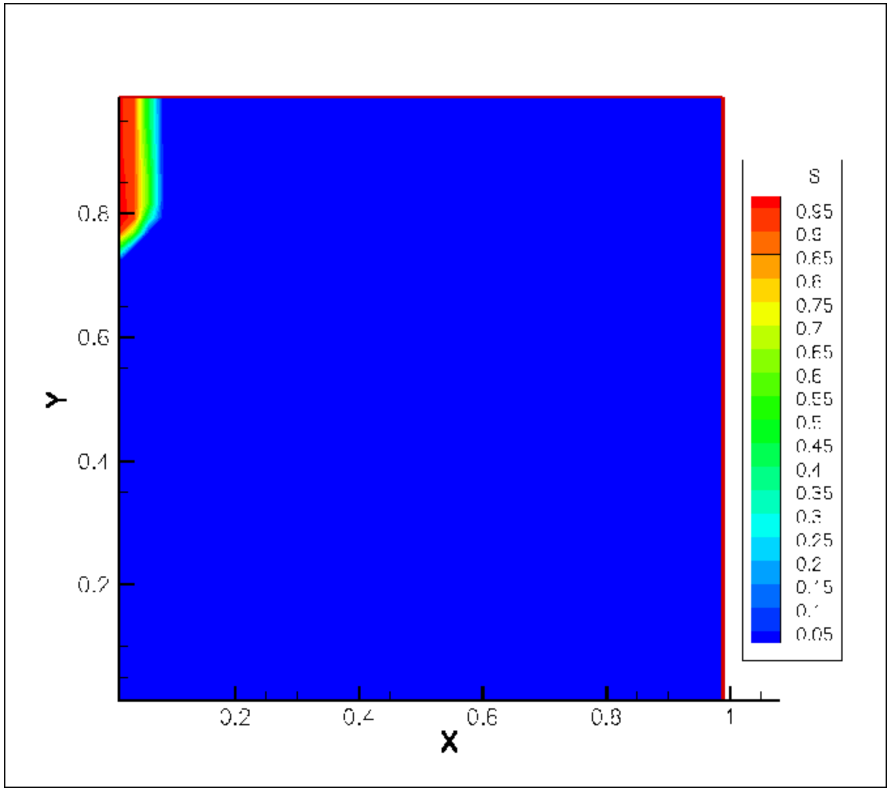


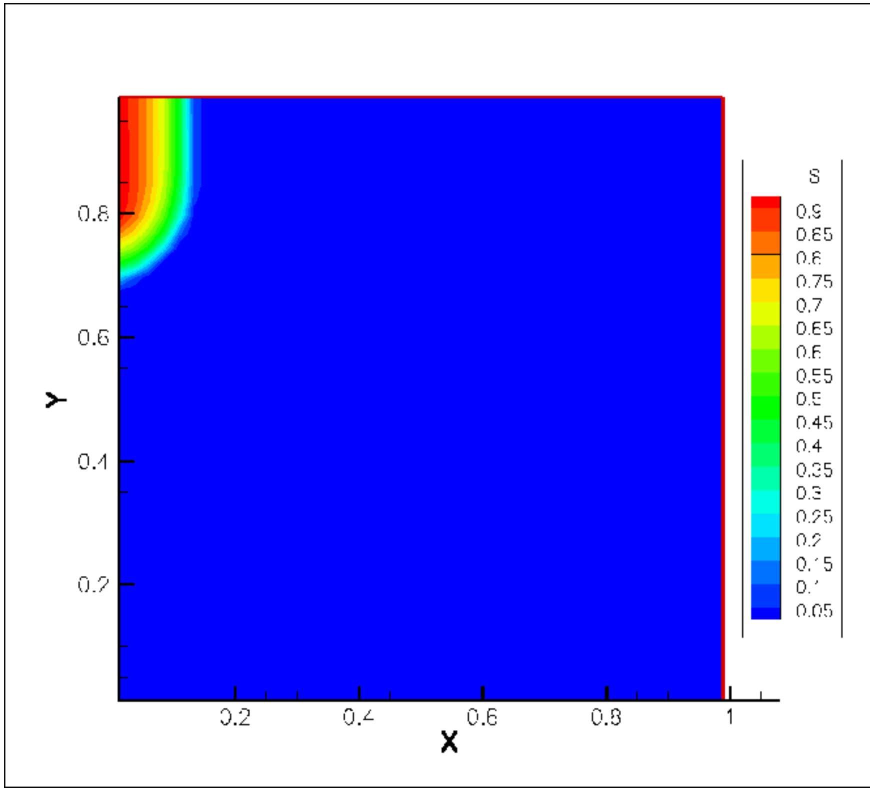
Un cas test : Incompressible/compressible



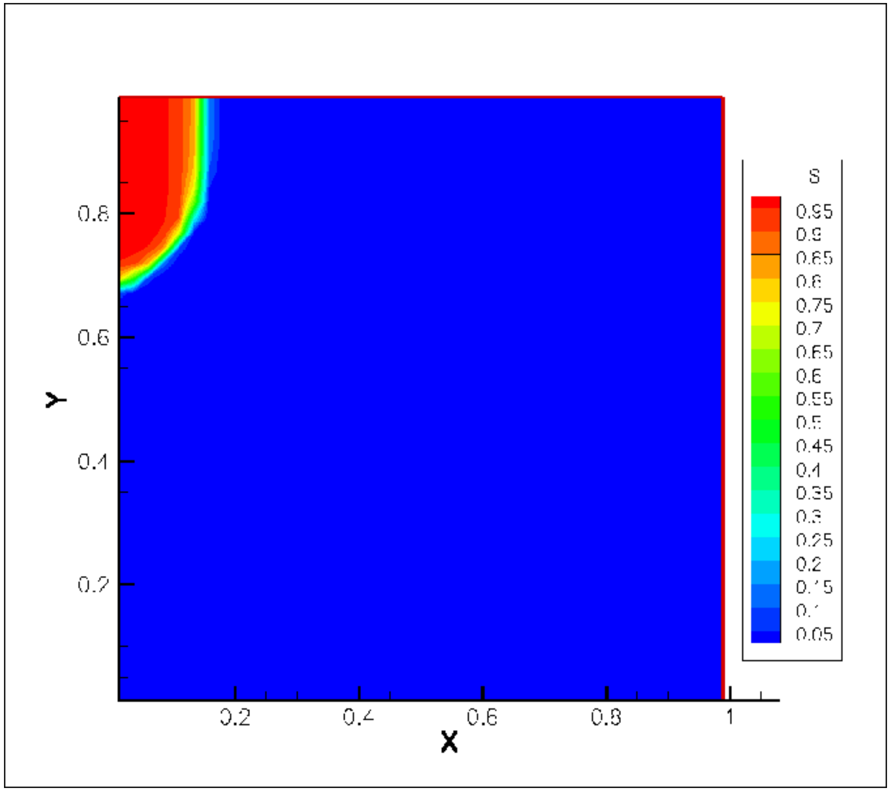


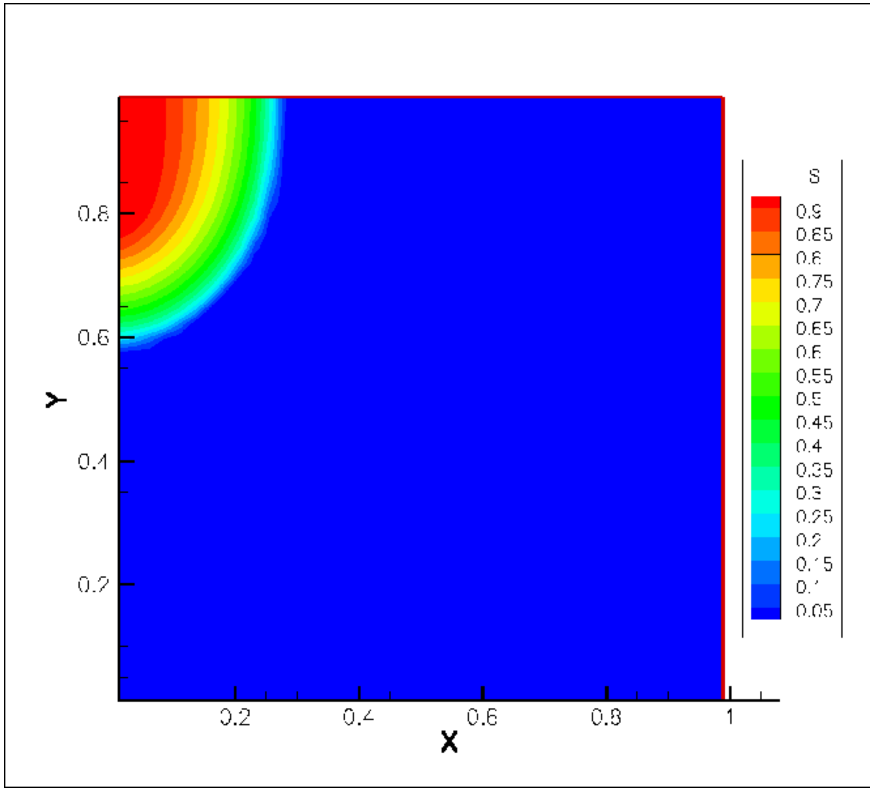
Un cas test : compressible sans/avec pression capillaire



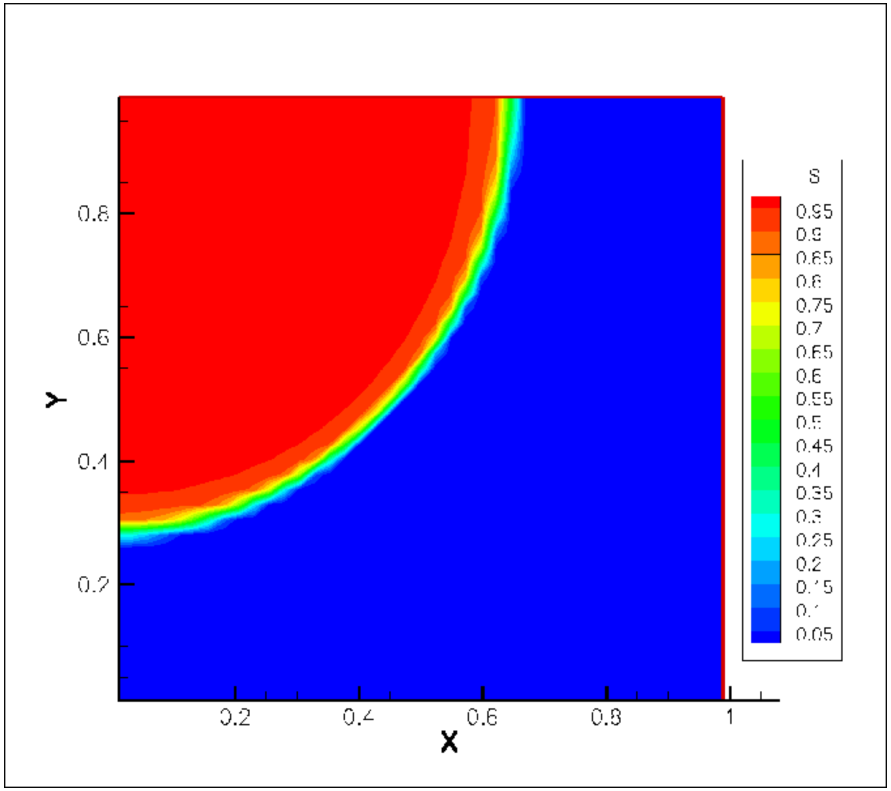


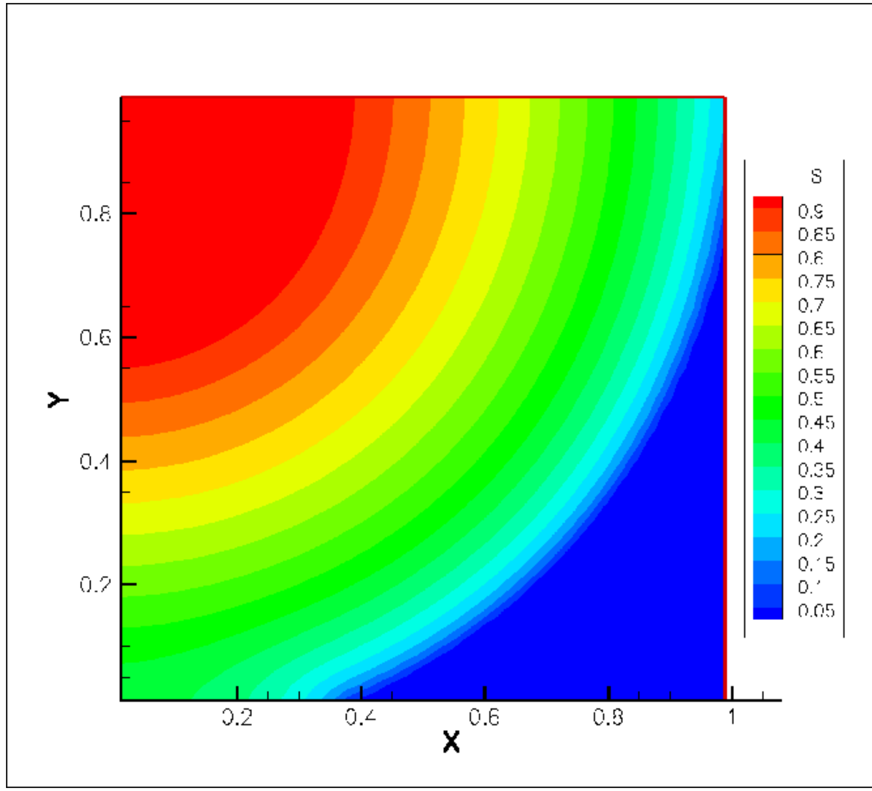
Un cas test : **compressible sans/avec pression capillaire**



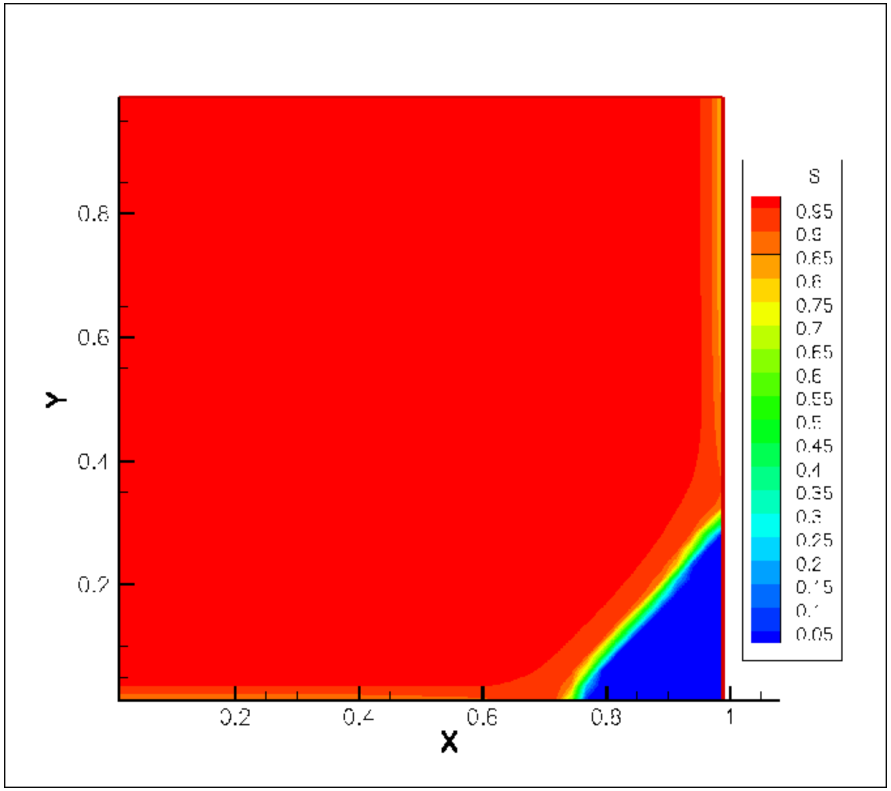


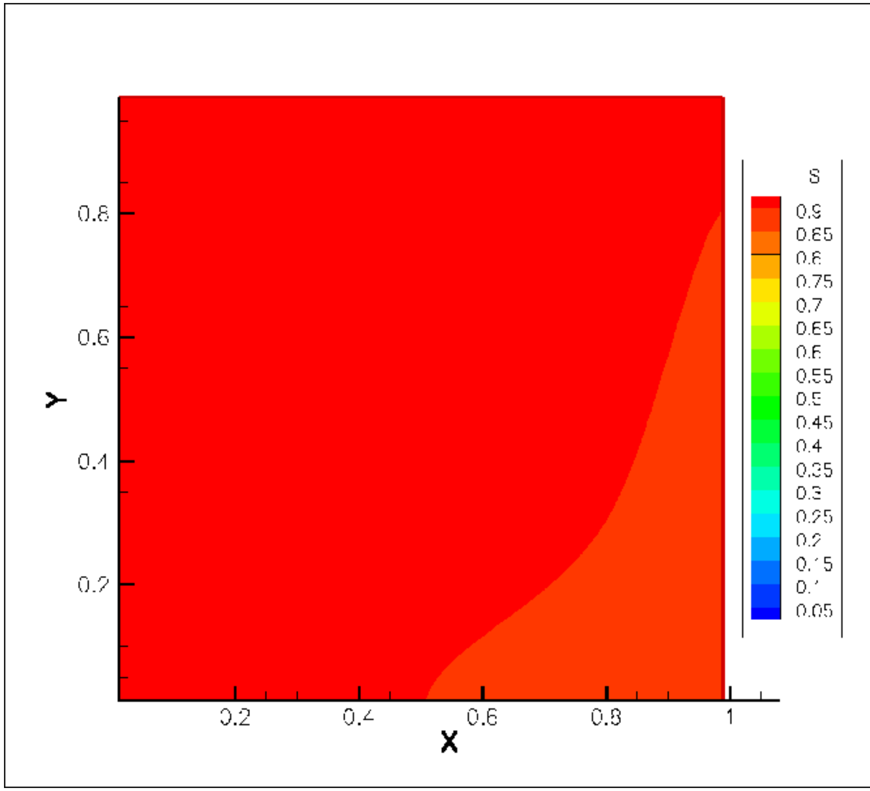
Un cas test : compressible sans/avec pression capillaire





Un cas test : compressible sans/avec pression capillaire





Modélisation

- Modèle à pression globale

Modèle eau-gaz

- Hypothèses
- Problème de Cauchy
- Eléments de preuve.

Modèle à 2 fluides

- Densités bornées
- Fluides faiblement compressibles

Modélisation

conservation de la masse:

$$\phi(x)\partial_t(\rho_i s_i)(t,x) + \mathrm{div}(\rho_i \mathbf{V}_i)(t,x) + \rho_i s_i f_P(t,x) = \rho_i s_i^\star f_I(t,x), \qquad i = 1, 2,$$

Modélisation

conservation de la masse:

$$\phi(x)\partial_t(\rho_i s_i)(t,x) + \mathrm{div}(\rho_i \mathbf{V}_i)(t,x) + \rho_i s_i f_P(t,x) = \rho_i s_i^\star f_I(t,x), \qquad i = 1,2,$$

Loi de Darcy pour les vitesse $\mathbf{V}_i$

$$\mathbf{V}_i(t,x) = -\mathbf{K}(x)\frac{k_i(s_i(t,x))}{\mu_i}\nabla p_i(t,x), \qquad i = 1,2,$$

les saturations:

$$s_1 + s_2 = 1.$$

Densité et pression capillaire

$$\rho_i = \rho_i(p_i), \qquad p_1 - p_2 = p_{12}(s_1).$$

Modélisation

Pression capillaire

$$p_{12}(s_1(t,x)) = p_1(t,x) - p_2(t,x)$$

et la fonction $s \longrightarrow p_{12}(s)$ est croissante

Modélisation

Pression capillaire

$$p_{12}(s_1(t,x)) = p_1(t,x) - p_2(t,x)$$

et la fonction $s \longrightarrow p_{12}(s)$ est croissante
On choisit $s = s_1$.

$M_i(s) = k_i(s)/\mu_i$ mobilité de la phase i

$M(s) = M_1(s) + M_2(s)$ la mobilité totale,

$\mathbf{V} = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2$ la vitesse totale.

$$\mathbf{V}(t,x) = -\mathbf{K}(x)M(s)\left(\nabla p_2(t,x) + \frac{M_1(s)}{M(s)}\nabla p_{12}(s)\right),$$

On définit $\tilde{p}(s)$ par $\frac{d\tilde{p}}{ds}(s) = \frac{M_1(s)}{M(s)}\frac{dp_{12}}{ds}(s)$, et la pression globale $p = p_2 + \tilde{p}$

$$\mathbf{V}(t,x) = -\mathbf{K}(x)M(s)\nabla p(t,x). \qquad (1)$$

Modélisation

$$\mathbf{V}_1 = -\mathbf{K}M_1(s)\nabla p - \mathbf{K}\alpha(s)\nabla s$$

$$\mathbf{V}_2 = -\mathbf{K}M_2(s)\nabla p + \mathbf{K}\alpha(s)\nabla s$$

où $\alpha(s) = \frac{M_1(s)M_2(s)}{M(s)}\frac{dp_{12}}{ds}(s) \geq 0$.

$$\phi\partial_t(\rho_1(p_1)s_1) - \mathrm{div}(\rho_1(p_1)\mathbf{K}M_1(s)\nabla p + \mathbf{K}\rho_1(p_1)\alpha(s)\nabla s) + \rho_1(p_1)s_1 f_P = \rho_1(p_1)s_1^\star f_I,$$

$$\phi\partial_t(\rho_2(p_2)s_2) - \mathrm{div}(\rho_2(p_2)\mathbf{K}M_2(s)\nabla p - \mathbf{K}\rho_2(p_2)\alpha(s)\nabla s) + \rho_2(p_2)s_2 f_P = \rho_2(p_2)s_2^\star f_I,$$

$$s = s_1, \qquad s_1 + s_2 = 1.$$

Modélisation, pression globale

Simplification du modèle (Jaffré et Chavent 86):
pression globale p voisin de p_1 et p_2 ($p_1 - p_2$ petit):

$$\phi\partial_t(\rho_1(p)s_1) - \mathrm{div}(\rho_1(p)\mathbf{K}M_1(s)\nabla p + \mathbf{K}\rho_1(p)\alpha(s)\nabla s) + \rho_1(p)s_1 f_P = \rho_1(p)s_1^\star f_I.$$

$$\phi\partial_t(\rho_2(p)s_2) - \mathrm{div}(\rho_2(p)\mathbf{K}M_2(s)\nabla p - \mathbf{K}\rho_2(p)\alpha(s)\nabla s) + \rho_2(p)s_2 f_P = \rho_2(p)s_2^\star f_I.$$

$$s = s_1, \qquad s_1 + s_2 = 1.$$

Mélange EAU-GAZ: $\rho_1 = \rho$, $\rho_2 = Cste$:

$$\phi\partial_t(\rho(p)s) - \mathrm{div}(\rho(p)\mathbf{K}M_1(s)\nabla p + \mathbf{K}\alpha(s)\nabla s) + \rho(p)sf_P(t,x) = \rho(p)s_1^\star f_I.$$

$$\phi\partial_t s + \mathrm{div}(\mathbf{K}M_2(s)\nabla p - \mathbf{K}\alpha(s)\nabla s) - (1-s)f_P = -s_2^\star f_I.$$

L'eau est injectée: $s_2^\star = 1$, $s_1^\star = 0$.

Modèle eau-gaz

Dégénérescences:

une dégénérescence dans l'évolution

une dégénérescence dans la dissipation en pression: $M_1(0) = 0\,,\ M_2(1) = 0\,$.

une dégénérescence dans la dissipation en saturation: $\alpha(0) = 0\,$.

$$\phi(x)\partial_t(\rho(p)s) - \mathrm{div}(\mathbf{K}\rho(p)M_1(s)\nabla p) - \mathrm{div}(\mathbf{K}\rho(p)\alpha(s)\nabla s) + \rho(p)sf_P = 0,$$

$$\phi(x)\partial_t s + \mathrm{div}(\mathbf{K}M_2(s)\nabla p) - \mathrm{div}(\mathbf{K}\alpha(s)\nabla s) + sf_P = f_P - f_I.$$

Conditions aux limites:

$$s(t,x) = 0, \quad p(t,x) = 0 \text{ on } \Gamma_w$$

$$\mathbf{K}\nabla p \cdot \mathbf{n} = \mathbf{K}\alpha(s)\nabla s \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \Gamma_i,$$

conditions initiales:

$$\begin{cases} s(0,x) = s_0(x), \text{ in } \Omega \\ (\rho(p)s)(0,x) = u_0(x) \text{ in } \Omega \end{cases} \tag{1}$$