tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

N° d'ordre: 287-2009

Thèse

présentée devant

l'Université Claude Bernard Lyon 1

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Lyon
Mention Mathématiques appliquées

par

Farid Smaï

Équipe d'accueil : ICJ, UMR 5208
École Doctorale : InfoMaths

Titre de la thèse :

Développement d'outils mathématiques et numériques pour l'évaluation du concept de stockage géologique

Soutenue le 8 décembre 2009 devant la commission d'examen.
Composition du jury :

Président		
Andro	Mikelić	Professeur, Université Lyon 1
Rapporteurs		
Alexandre	Ern	Professeur, École Nationale des Ponts et Chaussées
Olivier	Pironneau	Professeur, Université Paris 6 Membre de l'Académie des Sciences
Examinateurs		
Magdalena	Dymitrowska	Ingénieur-chercheur, IRSN
Sylvie	Granet	Ingénieur R&D, EDF
Mladen	Jurak	Professeur, Université de Zagreb
Directeur de thèse		
Alain	Bourgeat	Professeur émérite, Université Lyon 1
Co-directeur de thèse		
Olivier	Gipouloux	Maître de conférences, Université de Saint Étienne, ICJ

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé à l'Université Claude Bernard Lyon 1 au sein de l'Institut Camille Jordan (ICJ, UMR 5208 du CNRS) sous la direction de Alain Bourgeat et Olivier Gipouloux.

Je remercie Alexandre Ern et Olivier Pironneau d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail.

Je remercie également Magdalena Dymitrowska, Sylvie Granet, Mladen Jurak et Andro Mikelić pour leur participation au jury.

J'exprime ma plus sincère gratitude à Alain Bourgeat et Olivier Gipouloux qui ont su me guider dans ce travail sans me priver de liberté. Je les remercie pour la confiance qu'ils m'ont portée.

Je tiens à remercier sincèrement tous les membres du laboratoire, doctorants et enseignants, que j'ai côtoyé durant ces trois années. Merci pour toutes ces discussions enrichissantes. Merci pour tous ces bons moments aussi.

J'embrasse ma famille et particulièrement Caroline qui partage ma vie que ce soit dans les bons ou les mauvais moments.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Table des matières

Remerciements **iii**

Introduction **1**

I Homogénéisation en milieux poreux saturés avec sources aléatoires **9**

1 Contexte **11**
1.1 Problématique . . . 11
1.2 Physique du problème . . . 12
1.2.1 Description d'un milieu poreux . . . 12
1.2.2 Circulation de fluides en milieux poreux . . . 12
1.2.3 Convection (ou advection) . . . 14
1.2.4 Dispersion cinématique . . . 14
1.2.5 Diffusion moléculaire . . . 15
1.2.6 Dispersion hydrodynamique et opérateur de transport . . . 15
1.2.7 Sorption et transport . . . 16
1.2.8 Dégradation spontanée des composés radioactifs . . . 16

2 De la théorie... **19**
2.1 Formalisation du problème . . . 19
2.1.1 Description de la géométrie . . . 19
2.1.2 Description de l'aléa . . . 20
2.1.3 Description des équations . . . 22
2.2 Homogénéisation du problème aléatoire . . . 23
2.2.1 Convergence vers une limite déterministe . . . 23
2.2.2 Convergence en loi . . . 24
2.2.3 Interprétation . . . 26

3 ... à la pratique **29**
3.1 Vers le numérique : considérations diverses . . . 29
3.1.1 Calcul de la distribution et des moments . . . 29
3.1.2 Matrice de covariance : approximation de la fonction de Green . . . 33
3.1.3 Évaluation numérique des convolutions en temps . . . 34
3.1.4 Évalutation d'une distance entre distributions vectorielles . . . 35
3.2 Résultats numériques . . . 38
3.2.1 Un modèle de sources aléatoires . . . 38
3.2.2 Définition des cas test . . . 39
3.2.3 Implémentation . . . 41

3.2.4 Résultats 42

II Écoulement liquide/gaz en milieux poreux 49

4 Contexte 51
4.1 Problématique 51
4.2 Physique du problème 52
4.2.1 "Fluide" à deux phases et deux composants en milieux poreux 52
4.2.2 Conservation de la masse 53
4.2.3 Loi de Darcy généralisée 53
4.2.4 Diffusion moléculaire 54
4.2.5 Pression capillaire 55
4.2.6 Équilibre thermodynamique 56
4.2.7 Hypothèses physiques du modèle 58
4.2.8 Équations de l'écoulement 58
4.2.9 Condition d'existence de la phase de gaz 60

5 Modélisation 63
5.1 Les problèmes 63
5.1.1 De l'introduction d'une saturation résiduelle de gaz non nulle 63
5.1.2 Du traitement de la disparition du gaz 65
5.2 Une solution 65
5.2.1 Un modèle unifié pour les écoulements saturés/insaturés 66
5.2.2 Une première analyse du modèle 68
5.2.3 Retour sur le choix des variables 69
5.3 Adimensionnement et simplifications possibles 70
5.3.1 Adimensionnement du modèle 70
5.3.2 Simplification du modèle dans le cas d'un stockage 71

6 Étude de l'existence de solutions 73
6.1 Rappels sur le théorème d'existence d'Alt-Luckhaus 73
6.1.1 Hypothèses sur les données 74
6.1.2 Hypothèses sur les conditions initiales et aux limites 74
6.1.3 Rappels sur la définition d'une solution faible 74
6.1.4 Énoncé du théorème 75
6.2 Première tentative d'application du théorème 75
6.3 Construction d'un changement de variables 76
6.3.1 Introduction de nouvelles variables principales 77
6.3.2 Existence d'un potentiel convexe 77
6.3.3 Ellipticité de l'opérateur 79
6.3.4 Condition de croissance 81
6.4 Un théorème d'existence 82

7 Simulation numérique 85
7.1 Mise en œuvre 85
7.1.1 Discrétisation en temps 86
7.1.2 Résolution de la non linéarité 87
7.1.3 Résolution du problème linéaire 89
7.2 Des cas test 89

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

7.2.1 Cas test 1 : apparition et disparition de la phase gazeuse 90
7.2.2 Cas test 2 : milieu hétérogène 99
7.2.3 Cas test 3 : conditions initiales hors équilibre 103

8 Couplex-Gaz **107**
8.1 Définition de l'exercice 107
8.1.1 Géométrie 107
8.1.2 Paramètres physiques 107
8.1.3 Conditions aux limites 110
8.1.4 Conditions initiales 110
8.1.5 Seconds membres 110
8.1.6 Sorties demandées 111
8.1.7 Comparaison entre le modèle proposé et le modèle utilisé 111
8.2 Résultats numériques 112

9 Homogénéisation **119**
9.1 Construction d'un modèle effectif 119
9.1.1 Introduction de l'échelle rapide 120
9.1.2 Développement asymptotique 121
9.1.3 Équations macroscopiques 124
9.1.4 Définition des grandeurs effectives 128
9.1.5 Conditions initiales et conditions aux limites 131
9.2 Validation numérique 134
9.2.1 Définition du problème 134
9.2.2 Résultats numériques 139

Résumé **156**

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Table des figures

2.1 Domaine globale 20
2.2 Une source en variable locale 20
2.3 Configuration globale des sources 21

3.1 Géométrie du cas test pour la convolution 35
3.2 Évolution de $\|U - \bar{U}\|_{L^2}$ vs. Δt 36
3.3 Domaine des cas test et points d'observation 40
3.4 Évolution en temps de $\mathbf{E}[f(\cdot, t)]$ pour les cas test 1 et 2 41
3.5 Évolution en temps de $\sqrt{\mathrm{Var}[f(\cdot, t)]}$ pour les cas test 1 et 2 42
3.6 Évolution de $\mathbf{E}\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}$ vs. ε pour les deux cas test 43
3.7 Évolution de D_{gKS} vs. ε pour les deux cas test : cas scalaire 45
3.8 Évolution de D_{gKS} vs. ε pour les deux cas test : cas vectoriel 46

4.1 Représentation schématique de la courbe de pression capillaire 56
4.2 Existence de la phase gaz dans le diagramme (R_s, p_l) 61

5.1 Effet de la saturation résiduelle de gaz dans le diagramme (R_s, p_l) 64
5.2 Représentation schématique de la fonction f décrivant $S_g = f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right)$ et construite à partir de $P_c(S_g)$ 67

7.1 Définition de la géométrie des cas test 90
7.2 cas test 1 : phase 1 94
7.3 cas test 1 : phase 2 95
7.4 cas test 1 : phase 3 96
7.5 cas test 1 : phase 4 97
7.6 cas test 1 : indicateurs en entrée 97
7.7 cas test 1 : indicateurs en sortie 98
7.8 cas test 1 : position du front de saturation 98
7.9 cas test 2 101
7.10 cas test 2 : indicateurs en entrée 101
7.11 cas test 2 : indicateurs en sortie 102
7.12 cas test 2 : position du front de saturation 102
7.13 cas test 3 105
7.14 cas test 3 : indicateurs en entrée 105
7.15 cas test 3 : indicateurs en sortie 106
7.16 cas test 3 : position du front de saturation 106

8.1 Géométrie de l'exercice Couplex-Gaz (source ANDRA) 108
8.2 Évolution temporelle de la position du front de saturation 113
8.3 Évolution temporelle des flux d'hydrogène 114

8.4 Évolution temporelle de la pression du liquide, de la pression du gaz et de la saturation en gaz aux différents points d'observation. 115
8.5 Profils de la pression du liquide en $x = 103\,m$ aux différents temps d'observation. 116
8.6 Profils de la pression du gaz en $x = 103\,m$ aux différents temps d'observation. 117
8.7 Profils de la saturation en gaz en $x = 103m$ aux différents temps d'observation. 118

9.1 Homogénéisation de Couplex-Gaz 135
9.2 Loi de pression capillaire effective de la zone de colis homogénéisée 137
9.3 Loi de perméabilité relative effective de la phase liquide de la zone de colis homogénéisée 138
9.4 Loi de perméabilité relative effective de la phase gazeuse de la zone de colis homogénéisée 138
9.5 Tortuosité effective de la zone de colis homogénéisée 138
9.6 Évolution temporelle de la position du front de saturation. 141
9.7 Évolution temporelle des flux d'hydrogène. 142
9.8 Évolution temporelle de la pression du liquide, de la pression du gaz et de la saturation en gaz aux différents points d'observation. 143
9.9 Profils de la pression du liquide en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de 0 *ans* à 1000 *ans*. 144
9.10 Profils de la pression du liquide en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de 5000 *ans* à 20000 *ans*. 145
9.11 Profils de la pression du gaz en $x = 130m$ aux différents temps d'observation de 0 *ans* à 1000 *ans*. 146
9.12 Profils de la pression du gaz en $x = 130m$ aux différents temps d'observation de 5000 *ans* à 20000 *ans*. 147
9.13 Profils de la saturation en gaz en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de 0 *ans* à 1000 *ans*. 148
9.14 Profils de la saturation en gaz en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de 5000 *ans* à 20000 *ans*. 149

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Liste des tableaux

3.1 Caractéristiques du bruit résiduel 37
3.2 Valeurs numérique des paramètres de f_{C1} 39
3.3 Points d'observation 40
3.4 Valeurs des coefficients de corrélation et des sensibilités relatives dans les deux cas test 44

7.1 Valeurs des caractéristiques des fluides et des composants : cas eau/hydrogène 90
7.2 Données du cas test 1 : conditions aux limites et initiales, caractéristiques du milieu poreux et géométrie 91
7.3 Données du cas test 2 : conditions aux limites et initiales, caractéristiques du milieu poreux et géométrie 99
7.4 Données du cas test 3 : conditions limites et initiales, caractéristiques du milieu poreux et géométrie 103

8.1 Valeurs des paramètres géométriques de l'exercice Couplex-Gaz 109
8.2 Valeurs des caractéristiques des fluides et des composants 109
8.3 Valeurs des caractéristiques du milieu poreux selon le matériau 109

9.1 Valeurs des caractéristiques du milieu poreux selon le matériau. 134

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Introduction

Découvertes à la fin du XIX^{ième} siècle, la radioactivité et ses propriétés ont trouvé aujourd'hui de nombreuses applications dans des champs très variés : industriel, médical, recherche, militaire... Faute de procédés permettant l'élimination totale de la radioactivité, une conséquence de ces diverses utilisations est la production de déchets radioactifs (*i.e.* de matière non valorisable) provenant, soit de l'irradiation de matériaux initialement inertes, soit de la désintégration de matières radioactives. On préfère cependant classifier ces déchets selon leur activité et leur durée de vie, les plus problématiques étant bien sûr ceux présentant à la fois une activité et une durée de vie élevées (on parle de déchets HA et MA-VL pour haute activité et moyenne activité à vie longue).

Les modes de gestion envisagés varient suivant la catégorie des déchets mais le principe de base reste le même : isoler les déchets radioactifs du reste de l'environnement jusqu'à ce que leur activité ait suffisamment diminuée ou, éventuellement, qu'une solution alternative de traitement soit trouvée (voir par exemple [GB06] pour un aperçu plus général de ces questions). Cet isolement passe en premier lieu par un conditionnement adapté. En France, où cette mission de gestion des déchets est confiée à l'ANDRA (Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs), les déchets de haute activité à vie longue sont confinés dans une matrice de verre et coulés dans des conteneurs en acier. La durée d'activité de ce type de conteneur, encore appelé colis, se comptant en millions d'années, la question de leur stockage est essentielle. Une solution étudiée est le stockage en couche géologique profonde qui consiste à déposer les colis de déchets dans des ouvrages souterrains creusés dans un milieu géologique stable et très peu perméable. Ce concept de stockage géologique propose ainsi de rajouter à la première barrière qu'est le conteneur, une barrière ouvragée pouvant être interposée entre les colis et la roche et une barrière géologique qui est la roche hôte elle-même.

L'évaluation de la fiabilité d'un tel stockage pose des problèmes complexes et ne peut s'appuyer exclusivement sur l'expérimentation, en particulier du fait des temps mis en cause (de la centaine au million d'années). La simulation numérique s'impose donc comme un moyen nécessaire à la validation d'un concept de stockage géologique. Cependant la simulation numérique n'est pas une chose aisée, elle s'appuie sur la formulation mathématique d'un modèle physique et dépend des données utilisées (coefficients des équations, conditions initiales, conditions aux limites...). A tous ces niveaux (modélisation physique, formulation mathématique, détermination des données) des choix sont opérés qui influent, plus ou moins fortement, sur le résultat final de la simulation. Un dernier point, tout aussi essentiel, réside dans le calcul effectif, à l'aide de l'outil informatique, de la simulation c'est-à-dire la recherche algorithmique d'une solution approchée du problème mathématique.

Un site de stockage géologique présente une grande diversité de phénomènes physiques. La roche et certains matériaux ouvragés comme les bétons présentent une micro-structure

poreuse constituée d'une matrice solide et de vides, des fluides pouvant circuler à travers ce réseau de pores. Des réactions physico-chimiques peuvent naître de l'interaction des différents fluides entre eux, d'un fluide avec le solide ou encore d'espèces dissoutes dans un fluide avec le solide ou un autre fluide. Dans le cas de fluides immiscibles (plusieurs phases fluides), des effets capillaires apparaissent aux interfaces entre fluides. Enfin, l'activité radioactive des colis entraine un dégagement de chaleur pouvant influer sur toutes ces interactions mécaniques et chimiques. Les colis, où sont confinés les radionucléides, sont le siège de mécanismes physiques et chimiques complexes dues à l'action combinée de la radioactivité, de la température et de l'eau contenue dans le milieu géologique, entrainant sur le long terme la dégradation des matériaux le constituant (verres, métaux...) et susceptible de relâcher les radionucléides eux-mêmes mais aussi d'autres composants comme de l'hydrogène. Le but de la modélisation physique est ainsi de capter ces phénomènes et leurs couplages pour représenter au mieux les transferts de matières et de chaleurs qui ont lieu dans un site de stockage.

La fiabilité des prédictions faites à partir d'un modèle physique dépend évidemment de la qualité des données utilisées, or la détermination de ces dernières peut s'avérer complexe voire inaccessible si l'on vise à l'exhaustivité. Tout d'abord, toute mesure expérimentale comporte une incertitude, le travail de l'expérimentateur étant justement de quantifier et de minimiser cette incertitude. Mais il est parfois tout simplement impossible d'effectuer la mesure des données désirées. Par exemple, dans le cas d'un site de stockage, l'étendue du milieu géologique et sa variabilité sur une échelle réduite interdisent de connaître exactement ses caractéristiques physiques en tout point. On s'affranchit le plus souvent de cette limitation en supposant que, dans chaque couche géologique, la variabilité est suffisamment réduite et que la couche peut être assimilée à un matériau uniforme. Un autre exemple est le relâchement des radionucléides par les colis. En effet, le fait que les mécanismes en jeu dans ce phénomène se déroulent sur des temps longs (de la centaine au millier d'années) et dépendent fortement de l'histoire du colis conduit à l'impossibilité, d'une part d'observer, mais surtout de prévoir exactement le comportement d'un colis en particulier. Et ce, bien qu'il soit possible de dégager un comportement global, probable, des colis. Dans ce dernier cas, la connaissance de l'incertitude sur les données devient aussi essentielle que la connaissance des données elles-mêmes.

Une fois le modèle physique et les données formulés en termes mathématiques, il est possible de s'intéresser à la simulation numérique à proprement parler. La question est alors de déterminer les outils mathématiques capables de traiter le problème, où le cas échéant de les élaborer, pour ensuite les implémenter sur une machine de calcul. Bien que les avancées actuelles, tant dans le champ mathématique qu'informatique, permettent de résoudre des problèmes toujours plus riches et complexes, le coût en mémoire et en temps de certains calculs peut toujours devenir prohibitif. La simulation d'un site de stockage géologique est propice à ce type de difficultés. En effet, si les équations issues de la modélisation sont relativement classiques, le site de stockage se distingue néanmoins par sa géométrie et ses temps caractéristiques. Le site de stockage vise à accueillir un grand nombre de conteneurs, installés dans un réseau de galeries s'étendant dans une couche géologique profonde ; sa géométrie parcourt ainsi des échelles de longueur allant du mètre au kilomètre. Sa description exhaustive requiert donc une grande quantité d'informations, ce qui se répercute directement sur les besoins en mémoire et en temps de calcul. D'autre part, un site de stockage combine des dynamiques de temps long (écoulements dans les roches, désintégration radioactive,...) avec des temps courts (déséquilibres hydrostatiques dus au creusement des galeries, réactions chimiques,...), ce qui peut encore augmenter les temps de calcul de la simulation numérique.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Face à ces diverses problématiques, le travail mené dans cette thèse porte sur deux aspects différents rencontrés dans un site de stockage géologique. A travers ces deux axes, ce travail analyse et développe des concepts et des outils mathématiques pour aider à une meilleur compréhension du comportement d'un site de stockage, enrichissant ainsi la panoplie des moyens pour évaluer la fiabilité de cette forme de gestion des déchets radioactifs.

Le premier axe, directement lié à la fonction du stockage, concerne le transport des radionucléides dans le milieu géologique et en particulier l'influence de la variabilité, abordée sous un angle probabiliste, du relâchement des radionucléides par les colis. En s'appuyant sur la configuration très particulière du site de stockage (agencement régulier des colis sur un plan horizontal), on propose une méthode déterministe (en opposition avec les méthodes de décomposition pour la résolution d'équations aux dérivés partielles stochastiques) pour approcher le champ, aléatoire, de concentration de radionucléides. Cette méthode repose sur le travail d'homogénéisation d'une équation de type convection-diffusion avec un second membre aléatoire réalisé par A. Bourgeat et A. Piatnitski dans [BP08].

Le second axe met de côté la question des radionucléides pour s'intéresser à un phénomène susceptible d'altérer la fonction de confinement du site de stockage : la génération d'hydrogène due à la dégradation de certains matériaux du stockage. L'accumulation de l'hydrogène dans le stockage peut en effet générer la formation d'une phase gazeuse de forte pression qui risquerait d'endommager mécaniquement le stockage et la roche environnante. Le développement de cette phase gazeuse dans le stockage et le milieu géologique peut de plus modifier les flux d'eau responsables du transport des radionucléides. Par un retour sur les concepts physiques des écoulements liquide/gaz en milieux poreux, on établit une formulation mathématique du transport du mélange eau/hydrogène dans un site de stockage géologique à même de capter l'apparition et la disparition de la phase gazeuse. L'existence de solutions pour cette formulation est étudiée et une méthode de résolution est construite. On s'intéresse enfin aux moyens de pallier au coût en mémoire et en temps de calcul de la simulation numérique entrainé par la complexité de la géométrie d'un site de stockage. On propose ainsi, via un processus d'homogénéisation, une méthode de construction d'un équivalent homogène à la zone de stockage. Le remplacement par un milieu homogène de cette zone à la géométrie complexe permet alors d'effectuer des simulations sur des échelles de longueur bien plus grandes et donc d'estimer les écoulements dans le milieu géologique loin du stockage.

Ce mémoire se compose de neuf chapitres répartis dans deux parties distinctes et dédiées aux axes de travail présentés plus haut. La première partie, intitulée "Homogénéisation en milieux poreux saturés avec sources aléatoires", regroupe les chapitres un à trois et la seconde partie, intitulée "Écoulements liquide/gaz en milieux poreux", regroupe les chapitres quatre à neuf.

Le premier chapitre est consacré à la modélisation physique du transport des radionucléides dans les milieux poreux saturés en liquide. On y présente, brièvement, les mécanismes les plus classiques à l'origine de l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux saturé et de la migration dans un milieu poreux d'une espèce chimique dissoute. Les interactions chimiques entre matrice solide et espèce dissoute sont évoqués et l'on y décrit le modèle le plus simple qu'est la sorption linéaire. Enfin, l'instabilité des radionucléides

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

est décrite et incluse à la modélisation habituelle du transport d'espèces chimiques.

On obtient ainsi l'équation usuelle du transport de radionucléides en milieux poreux saturés. Une attention particulière est portée dans ce chapitre à la mise en avant des hypothèses physiques invoquées dans cette modélisation ainsi qu'à la définition des caractéristiques physiques, des confusions étant possibles dans le vocabulaire issu des différentes spécialités (géologie, ingénierie, mathématique).

Le second chapitre est une présentation des travaux effectués par A. Bourgeat et A. Piatnitski publiés dans [BP08]. Partant de l'équation de transport établie au chapitre précédent, et dans une configuration des termes sources inspirée d'un site de stockage géologique, ces travaux effectuent l'homogénéisation du problème de transport dans le cas de sources aléatoires. Le site de stockage présente en effet la particularité de s'étendre uniquement dans les directions horizontales, la profondeur étant constante, et de disposer les colis de manière très régulière sur ce plan horizontal.

Une géométrie "modèle" du site de stockage consiste donc à définir un hyperplan Σ coupant en deux le domaine de calcul $\mathcal{D}$ et à répartir périodiquement sur Σ des parallélépipèdes qui représentent les colis, susceptibles d'être des sources de radionucléides. En introduisant le petit paramètre ε qui traduit le rapport entre la taille d'un colis et la taille du domaine $\mathcal{D}$, il est alors possible de procéder à l'homogénéisation du problème, c'est-à-dire à déterminer si la solution du problème de transport converge quand ε tend vers zéro, de quelle manière et de quel problème cette limite est solution.

Dans le cas où toute les sources sont identiques et ont toutes le même comportement dans le temps, il a été montré précédemment dans [BM04] et [BGM04] que l'homogénéisation du problème conduit à un problème similaire mais avec une source homogène et réduite à l'hyperplan Σ.

L'apport du travail mené dans [BP08] réside dans l'introduction de l'aléa dans le comportement des sources, ceci permet une modélisation plus réaliste du relâchement où les colis, bien que décrit par une même loi probabiliste, n'ont plus un comportement unique. De manière analogue au cas de sources identiques et déterministes, l'homogénéisation du problème aléatoire conduit à un problème de transport classique mais dont la source est homogène et réduite à l'hyperplan Σ. On notera que, sous une hypothèse d'ergodicité sur l'aléa des colis, la source homogénéisée devient, elle, déterministe. Ce résultat est complété par l'établissement d'un correcteur aléatoire gaussien d'ordre $\varepsilon^{(d-1)/2}$ (où $d \in \{2, 3\}$ est la dimension de l'espace). En effet, à la manière du théorème limite central de la théorie des probabilités, il est prouvé dans [BP08] que l'écart entre la solution aléatoire (et paramétrée par ε) et sa limite déterministe, une fois divisé par le facteur $\varepsilon^{(d-1)/2}$, converge en loi vers un champs gaussien. Le théorème associé explicite de plus la covariance de ce champ gaussien.

Le troisième chapitre est une mise en œuvre des résultats théoriques du chapitre précédent en vue de permettre leur utilisation en pratique. C'est aussi l'occasion d'observer numériquement les convergences prévues par la théorie.

On y présente une manière économique de calculer l'espérance de l'erreur L^2 entre la solution aléatoire à ε fixé et sa limite, mais surtout un moyen effectif d'évaluer numériquement la covariance du correcteur gaussien en s'appuyant sur une approximation parcimonieuse de la fonction de Green associée au problème de transport dans le domaine $\mathcal{D}$. Ces deux calculs faisant appel à des produits de convolution en temps sur une ou deux variables, on définit une convolution discrète pour les fonctions "discrètes" à une ou deux variables. Un point essentiel dans ces définitions est la consistance entre les produits de

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

convolution 1D et 2D pour des fonctions tensorisée. Cette propriété est nécessaire pour garantir que l'approximation de la covariance possède bien les propriétés attendues d'une covariance.

Afin d'observer numériquement la convergence en loi du correcteur, on propose enfin une généralisation de la distance de Kolmogorov-Smirnov au cas de vecteurs aléatoires. Une analyse pratique de cette distance entre distributions vectorielles aléatoires est menée pour en permettre une utilisation pertinente dans l'observation de la convergence en loi.

La dernière partie de ce chapitre présente un modèle aléatoire de relâchement des radionucléides et une configuration du site de stockage qui, bien qu'idéalisés, se veulent représentatifs de la dynamique d'un stockage géologique. Deux cas test sont déclinés de cette modélisation idéalisée, sur lesquels on observe la convergence de la solution aléatoire vers sa limite déterministe et la convergence en loi du correcteur aléatoire.

Le quatrième chapitre se consacre à la modélisation physique du transport d'un mélange eau/hydrogène dans un site de stockage géologique qui sera utilisée dans les chapitres suivants. On y expose les considérations usuelles sur les écoulements multiphasiques immiscibles en milieux poreux que sont la conservation de la masse, la loi de Darcy généralisée et la pression capillaire. L'hydrogène étant un composant extrêmement soluble, on introduit toutefois un formalisme permettant de considérer des phases non pures, la phase liquide pouvant ainsi contenir de l'hydrogène sous forme dissoute et la phase gazeuse de l'eau sous forme vaporisée. Les phénomènes de diffusion moléculaire qui ont lieu au sein d'une phase non pure sont explicités, mais surtout un point est fait sur les échanges de matière entre les phases qui ont lieu à l'équilibre thermodynamique.

Cet exposé de la physique des écoulements eau/hydrogène en milieux poreux aboutit à un jeu d'équations décrivant ces écoulements et dont les hypothèses physiques constitutives sont clairement identifiées. La fin du chapitre souligne que la modélisation physique obtenue est en mesure de décrire aussi bien un écoulement à deux phases (gaz et liquide) qu'un écoulement à une phase (liquide seul). On y explique en particulier comment les effets capillaires et thermodynamiques entrent en compétition pour permettre, ou non, l'existence de la phase gazeuse.

Le cinquième chapitre s'intéresse à la formulation mathématique du modèle physique présenté au chapitre précédent. Une revue des approches existantes montre tout d'abord les limitations fortes induites par l'introduction artificielle d'une saturation résiduelle en gaz. Il apparaît que les autres approches existantes, si elles permettent effectivement de prendre en compte l'apparition et la disparition de la phase gazeuse, passent toutes par un traitement au niveau de la méthode numérique pour gérer ce changement de régime.

On propose donc une nouvelle approche qui permet, par un choix judicieux des variables principales, de décrire les deux régimes (avec ou sans phase gazeuse) dans une unique formulation mathématique. On obtient ainsi un système de deux équations aux dérivées partielles non linéaires décrivant les écoulements eau/hydrogène en milieu poreux et captant l'apparition/disparition de la phase gazeuse. Cette nouvelle formulation est mise en regard avec celle obtenue dans un travail précédent (A. Bourgeat, M. Jurak et F. Smaï [BJS09]) qui présentait des difficultés dans le cas de milieux poreux hétérogène désormais résolues. L'adimensionnement de ce modèle mathématique permet enfin de proposer des simplifications du modèle dans le contexte d'un site de stockage géologique.

Le sixième chapitre propose une étude de l'existence de solutions pour notre nouveau

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

modèle. Si des travaux existent dans le cadre des écoulements multiphasiques incompressibles et immiscibles (voir par exemple les ouvrages [AKM90], [CJ86] et [GMT96] et les articles [AD85] et [Che01]), les techniques employées ne s'appliquent plus quand les phases deviennent compressibles (cas liquide/gaz par exemple). Une étude du cas compressible, mais sans échanges de matière entre les phases, a été menée dans [GS08] par C. Galusinski et M. Saad. Pour le cas compressible et avec échanges entre les phases, qui correspond à la situation eau/hydrogène, il existe le travail de A. Mikelic, [Mik09], qui établit l'existence d'une solution sous la condition de petites données pour la concentration d'hydrogène.

On s'intéresse donc à l'étude de l'existence de solutions faibles pour notre modélisation du cas liquide/gaz avec échange entre les phases et apparition/disparition de la phase gazeuse, si possible en s'affranchissant de la condition de petites données sur l'hydrogène. La stratégie explorée ici consiste en une réécriture du système d'équations à l'aide d'un changement de variables adéquat (rendant en particulier l'opérateur symétrique) de manière à faire entrer la nouvelle formulation dans le cadre de la théorie générale des équations différentielles quasilinéaires elliptiques-paraboliques introduites par H.W. Alt et S. Luckhaus dans [AL83]. On obtient ainsi un résultat d'existence pour le nouveau modèle sous l'hypothèse que la solution reste arbitrairement bornée.

Le septième chapitre porte sur la simulation numérique de l'écoulement du mélange eau/hydrogène en milieux poreux. Après avoir introduit une discrétisation implicite en temps des équations, on développe une méthode de quasi-Newton sur le système continu en espace pour traiter les non linéarités du problème. On propose enfin de résoudre les équations aux dérivés partielles linéaires intermédiaires par une méthode de volumes finis. Cette approche a été implémentée dans le code de calcul *Cast3m* (voir [CEA]).

La suite du chapitre présente des cas test, et leurs simulations, que nous avons développés pour éprouver les capacités du modèle et sa mise en œuvre à traiter des situations rencontrées dans la simulation d'un site de stockage géologique. Ces cas test se veulent aussi élémentaires que possible pour se focaliser chacun sur problème physique et/ou numérique particulier. Ils ont d'ores et déjà été mis à la disposition du GNR MoMaS, [MoM], pour permettre de comparer les différents codes utilisés ou développés par la communauté pour la simulation des écoulements en milieux poreux. Le premier cas test consiste en une injection d'hydrogène pur dans un milieu poreux homogène initialement saturé en eau pure. On y observe l'apparition, le développement et la disparition d'une phase gazeuse dans le milieu. Le second cas test reprend la configuration du premier mais introduit une hétérogénéité en remplaçant le milieu poreux homogène par deux milieux adjacents différents. On y observe en particulier les effets capillaires à l'interface des deux milieux qui sont à l'origine d'une discontinuité de la saturation. Enfin, le dernier cas test considère le retour à l'équilibre, dans un milieu poreux homogène, d'une configuration liquide/gaz initialement hors équilibre du fait d'une discontinuité de la pression du gaz.

Le huitième chapitre met en pratique le travail du chapitre précédent sur une configuration plus représentative d'un site de stockage géologique : le cas test "Couplex-Gaz 1" (voir [AND]) proposé par l'ANDRA. Ce cas test vise à simuler la dynamique de resaturation d'une alvéole de déchets, la dégradation des colis étant une source d'hydrogène. C'est un exercice bi-dimensionnel qui se caractérise par une géométrie complexe, de forts contrastes de roches et des conditions initiales hors équilibre.

Après une présentation de l'exercice, on expose les résultats de la simulation effectuée à l'aide de notre modèle de l'écoulement eau/hydrogène en milieu poreux. Il est à noter que cet exercice est difficile et que les résultats des différentes équipes ayant participé au

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

benchmark organisé par l'ANDRA ne se recoupent que de manière qualitative.

Le neuvième et dernier chapitre est consacré à l'homogénéisation, périodique, du modèle d'écoulements diphasique eau/hydrogène en milieu poreux définit au chapitre cinq.

En considérant que les données du problème oscillent rapidement dans l'espace adimensionalisé avec une période de l'ordre de ε, un paramètre positif supposé petit, et en procédant au développement asymptotique en puissances successives de ε des équations du modèle, on montre que les inconnues à l'ordre zéro en ε ne dépendent pas de ε, et en particulier ne sont pas oscillantes, et qu'elles sont solutions d'un système d'équations, dites macroscopiques, où le petit paramètre ε n'intervient pas. Via une analyse de ces équations et la définition adéquate de grandeurs effectives, on montre dans un second temps que les équations macroscopiques conservent la structure des équations d'origines. Ce dernier résultat nous permet, partant d'un milieu poreux dont les caractéristiques oscillent rapidement, de construire les caractéristiques d'un milieu poreux homogène (*i.e* non oscillant) "équivalent" au premier et régi par les mêmes équations. On montre de plus que des termes sources et des conditions initiales oscillant rapidement trouvent aussi des équivalents homogènes.

On met ensuite en pratique cette technique d'homogénéisation sur l'exercice Couplex-Gaz traité de manière classique au chapitre huit. L'idée est de remplacer la zone des colis, qui est la région de l'exercice où la géométrie est la plus fine, par son équivalent homogénéisé. Les caractéristiques physiques et les lois constitutives de la zone homogénéisée sont calculées et présentées, puis l'on expose les résultats de la simulation du problème homogénéisé qui sont comparés avec ceux de la simulation du problème d'origine.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Première partie

Homogénéisation en milieux poreux saturés avec sources aléatoires

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 1

Contexte

La première partie de ce mémoire, qui regroupe les chapitres 1 à 3, traite de l'homogénéisation en milieux poreux saturés de termes sources aléatoires dans une configuration de stockage géologique. Après une contextualisation du problème, on présente un cadre et des résultats théoriques pour aborder ce problème, puis on s'intéresse à la mise en œuvre pratique de ces résultats.

Ce chapitre expose tout d'abord la problématique, en termes de stockage géologique des déchets radioactifs, qui nous amène à considérer l'homogénéisation de termes sources aléatoires. Suit une présentation de la modélisation physique de la migration d'une espèce radioactive en milieu géologique qui conduit aux équations décrivant ce phénomène.

1.1 Problématique

L'ensemble des phénomènes intervenant dans un site de stockage relève de la physique classique, ceux-ci sont donc, par nature, déterministes. Prédire exactement l'évolution d'un système nécessite néanmoins de connaître exactement les données et les caractéristiques du problème. Cette connaissance totalement exhaustive n'est pas toujours atteignable et, en particulier, dans le cas d'un site de stockage qui est à la fois très étendu et le siège de mécanisme complexe.

Si l'on s'intéresse à une des fonctions premières d'un site de stockage géologique, qui est de pallier à la défaillance éventuelle des colis où sont confinés les déchets radioactifs, on constate qu'il n'est pas possible de prédire avec exactitude le moment et la manière dont les radionucléides s'échapperont d'un colis. Ceci ne signifie pas que l'on ne sait rien, mais pointe plutôt la nécessité d'adopter le formalisme probabiliste, à même de décrire mathématiquement cette part d'ignorance, pour traiter correctement du relâchement des radionucléides par les colis.

Introduire les probabilités dans la modélisation de la migration des radionucléides dans un site de stockage géologique a cependant des implications fortes en termes de simulation numérique. Les méthodes de décomposition pour la résolution des équations aux dérivées partielles stochastiques, bien qu'actuellement en plein essor, restent malgré tout couteuses en moyen de calcul. L'homogénéisation des termes sources aléatoires, souvent utilisée pour réduire les coûts de calcul des simulations, apparait donc comme une approche alternative aux méthodes de décomposition. Elle permet en effet de simplifier conjointement la géométrie du problème et de caractériser l'aléa de la solution en s'affranchissant de la question de la résolution des équations aux dérivées partielles stochastiques.

1.2 Physique du problème

Les sols peuvent être assimilés à des milieux poreux contenant une certaine proportion d'eau. La migration des espèces chimiques dans les sols s'y fait par le biais de l'eau qu'ils contiennent : les espèces chimiques sont dissoutes dans l'eau, et les sols, perméables, permettent la circulation de l'eau et des espèces. On peut distinguer deux types de contributions essentielles dans la migration d'une espèce : d'une part un mouvement d'ensemble porté par la circulation de l'eau dans le milieu (convection) ; d'autre part une tendance à uniformiser la concentration. Cette tendance provient de deux mécanismes distincts : la dispersion cinématique et la diffusion moléculaire. Selon la nature des espèces et du milieu, d'autres phénomènes peuvent encore influencer la migration.

On recense dans cette partie les différents mécanismes intervenant dans la propagation de radionucléides dans une formation géologique afin de formuler le modèle de base qui servira de référence dans la suite de notre étude. On pourra consulter les ouvrages de G. de Marsily ([dM81]) et de J. Bear ([Bea72]) pour une description plus approfondie de la physique de ces phénomènes.

1.2.1 Description d'un milieu poreux

En toute généralité, un milieu poreux est un matériau constitué par une matrice solide et des vides, appelés pores. La fraction volumique de vide d'une roche définit sa porosité totale. Ces vides peuvent être occupés par de l'eau, de l'air ou d'autres fluides. Dans notre contexte, on s'intéressera uniquement aux milieux saturés en eau, c'est-à-dire dans lesquels tous les vides sont remplis d'eau. On supposera dans toute la suite de cette étude que la matrice solide est indéformable.

Les écoulements du fluide saturant sont décrits, à l'échelle des pores, par les équations classiques des fluides (équations de Stokes ou de Navier-Stokes). Cependant, la complexité du réseau de pores est telle qu'elle rend inenvisageable l'utilisation directe de ces équations à l'échelle de la roche. De fait, même si l'on disposait de la description exacte de ce réseau de pores, nous ne serions pas en mesure de résoudre le problème qui en découle.

Nous allons voir dans les sections qui suivent que cela n'empêche pas pour autant d'établir des modèles relativement simples pour décrire les écoulements et le transport à l'échelle de la roche. Depuis l'expérience historique de H. Darcy en 1856 (voir [Dar56]), les physiciens ont en effet adopté une démarche plus globale pour décrire de manière effective les phénomènes se déroulant dans les milieux poreux. Cette démarche met de côté les principes fondamentaux de la physique pour construire des modèles heuristiques représentant au mieux les expériences. Parallèlement, des progrès dans le domaine mathématique ont fourni des outils conceptuels, tels que la théorie de l'homogénéisation, qui permettent aujourd'hui de faire le lien entre les modèles empiriques à l'échelle de la roche et la description physique plus fondamentale que l'on a à l'échelle des pores.

1.2.2 Circulation de fluides en milieux poreux

Pour décrire le transport d'espèces chimiques en milieux poreux, une première condition est de savoir comment l'eau, qui est le vecteur de ces espèces dissoutes, s'écoule dans le milieu. On peut caractériser un milieu poreux par deux grandeurs : sa porosité cinématique et sa perméabilité intrinsèque. Le volume poreux dans lequel l'eau peut circuler est inférieur au volume vide total, la porosité cinématique correspond ainsi à la fraction de la porosité totale contenant l'eau qui peut circuler. Ceci exclut donc les volumes correspondant à l'eau attachée à la surface des grains par le jeu des forces d'attraction moléculaire,

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

aux pores non connectés au réseau global, et aux pores en cul-de-sac dans lesquels l'eau est quasi immobile. La perméabilité intrinsèque est définie par la loi de Darcy (voir [Whi86]).

La loi de Darcy a d'abord été obtenue empiriquement par H. Darcy en 1857 pour un écoulement monodimensionnel à travers une colonne de sable homogène (voir [Dar56]). Elle a ensuite été expliquée en génie chimique et hydrologie par des techniques heuristiques de "prise de moyenne" mais aussi démontrée par homogénéisation. Sa validité est établit pour des écoulements à petite vitesse et sous certaines hypothèses sur la géométrie des pores ; des corrections à cette loi ont été proposées par P. Forchheimer (voir [For01]) et H.C. Brinkman (voir [Bri49]) qui étendent ces conditions de validité. Historiquement, sa première formulation, dans le cadre de l'expérience de la colonne de sable, est la suivante :

$$Q_v = -KA\frac{dh}{dl}$$

avec Q_v le débit (L^3T^{-1}), K une constante appelée conductivité hydraulique ou perméabilité (LT^{-1}), A l'aire de la section perpendiculaire à l'écoulement (L^2), $\frac{dh}{dl}$ le gradient de charge hydraulique. La charge hydraulique en un point s'exprimant de manière générale ainsi :

$$h = \frac{p}{\rho g} + z$$

avec p la pression ($ML^{-1}T^{-2}$), ρ la masse volumique (ML^{-3}), g l'accélération de la pesanteur (LT^{-2}) et z la profondeur (L). Si on divise le débit Q_v par la section A, on obtient une vitesse, v, dite vitesse de Darcy correspondant à une vitesse fictive puisqu'elle suppose que toute la surface, y compris la matrice, participe à l'écoulement. En conséquence, on définit une vitesse moyenne du fluide dans les pores comme la vitesse de Darcy divisée par la porosité cinématique.

On généralise cette loi au cas générale tridimensionnel et anisotrope pour obtenir :

$$\mathbf{V} = -\bar{\bar{K}}\nabla(h)$$

avec cette fois $\mathbf{V}$ la vitesse de Darcy vectorielle (LT^{-1}) et $\bar{\bar{K}}$ le tenseur de perméabilité (LT^{-1}). Dans le cas d'un fluide incompressible tel que l'eau, la conservation de la masse en régime permanent donne la relation suivante :

$$\nabla\left(\bar{\bar{K}}\nabla(h)\right) = 0$$

Cette dernière expression permet, avec la donnée de conditions limites aux bords du domaine, de déterminer la charge hydraulique h et par conséquent la vitesse de Darcy $\mathbf{V}$.

La perméabilité $\bar{\bar{K}}$ dépend des caractéristiques du milieu ainsi que des caractéristiques du fluide. On peut définir une perméabilité intrinsèque (L^2), $\bar{\bar{k}}$, ne dépendant que de la structure et de la connectivité des pores, à travers la relation :

$$\bar{\bar{K}} = \frac{\rho g}{\mu}\bar{\bar{k}}$$

avec g l'accélération de pesanteur, ρ la masse volumique du fluide et μ la viscosité dynamique du fluide ($ML^{-1}T^{-1}$).

Il est à noter que l'approche mathématique, par homogénéisation de l'écoulement de Stokes ou de Navier-Stokes dans le réseau de pores (voir par exemple [ESP75], [SP80] et [All89] pour le cas d'un réseau périodique ou [BK96] pour le cas aléatoire), démontre sous quelles hypothèses physiques et mathématiques on obtient la loi de Darcy ou, le cas échéant, d'autres lois (loi de Forchheimer par exemple pour les écoulements plus rapides).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

1.2.3 Convection (ou advection)

La convection est le mécanisme le plus intuitif de déplacement, il consiste en l'entrainement des éléments en solution par le fluide qui se déplace. L'équation de transport par convection pure dans un milieu monodimensionnel est la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_x \frac{\partial C}{\partial x}$$

avec C la concentration de l'espèce (ML^{-3}) et U_x la vitesse moyenne linéaire du fluide (LT^{-1}). Dans cette situation, pour une répartition spatiale donnée de la concentration, l'allure de cette répartition est conservée dans le temps et avance simplement à la même vitesse que celle du fluide.

Dans le cas tridimensionnel, l'équation de transport par convection pure en milieux poreux devient alors, avec $\mathbf{V}$ la vitesse de Darcy :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla (\mathbf{V} C)$$

ou dans le cas d'un fluide incompressible :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla (C)$$

1.2.4 Dispersion cinématique

Du fait de la microstructure du milieu, la vitesse du fluide varie en amplitude et en direction au sein du milieu poreux. Cette variation des vitesses à petite échelle entraine une dilution du soluté, appelée dispersion cinématique. Les principales causes de ces variations de vitesses sont les suivantes :

- profils des vitesses paraboliques, nulles sur les parois et maximales sur l'axe des capillaires intergrains ;
- dimension variable des pores qui a pour conséquence une variation des vitesses d'une section à l'autre ;
- cheminement localement différent, plus ou moins long par rapport à la direction de la vitesse moyenne.

Ainsi, du fait du mélange causé par la variabilité associée au mouvement de l'eau dans le milieu, les groupes de particules sont continument séparés pendant la circulation du fluide. Il en résulte un étalement longitudinal et transversal de la concentration autour du front convectif pur.

En ingénierie, on modélise ce phénomène par une loi phénoménologique similaire à la loi de Fick et, pour simplifier, on suppose que le coefficient de dispersion (L^2T^{-1}) s'exprime sous une forme tensorielle, symétrique, de second ordre $\bar{\bar{D}}'$ qui peut s'exprimer ainsi dans le cas tridimensionnel :

$$\bar{\bar{D}}' = \begin{bmatrix} D'_L & 0 & 0 \\ 0 & D'_T & 0 \\ 0 & 0 & D'_T \end{bmatrix}$$

où les directions principales du tenseur sont liées à l'écoulement. On définit ainsi D'_L le coefficient de dispersion longitudinal (L^2T^{-1}), dans le sens de l'écoulement, et D'_T le coefficient de dispersion transversal (L^2T^{-1}), dans les deux directions perpendiculaire à l'écoulement. Ces deux coefficients sont proportionnels à la vitesse linéaire de Darcy, $\mathbf{V}$, (voir [Sch61]) et peuvent donc s'écrire ainsi :

$$D'_L = \alpha_L \|\mathbf{V}\| \quad \text{et} \quad D'_T = \alpha_T \|\mathbf{V}\|$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

où α_L et α_T représentent la dispersivité (L), respectivement longitudinale et transversale. La dispersivité est une propriété caractéristique du milieu poreux mais également du champ de vitesse.

Cette modélisation est en partie appuyée par l'analyse mathématique. La théorie de l'homogénéisation permet en effet de retrouver, mais sous une forme plus complexe, ce type d'expression de la dispersion (voir [BJP03] et [ABJ06] ainsi que [MDvD06]).

1.2.5 Diffusion moléculaire

Contrairement à la dispersion cinématique, la diffusion moléculaire peut se dérouler indépendamment de la convection. C'est un phénomène physique lié à l'agitation moléculaire. Dans un fluide au repos, le mouvement brownien envoie des particules dans toutes les directions de l'espace. Si la concentration n'est pas homogène, c'est-à-dire qu'il existe un gradient de concentration entre deux points voisins, le point ayant la concentration la plus élevée enverra en moyenne plus de particules dans toutes les directions que l'autre point. La résultante sera donc un transfert de particules des zones à concentration élevée vers les zones à concentration faible selon la loi de Fick classique où le coefficient, scalaire, de diffusion moléculaire (L^2T^{-1}) traduit la proportionnalité du flux massique au gradient de concentration.

Dans les milieux poreux, la présence de grains ralentit la diffusion car les ions doivent alors suivre des chemins plus longs que dans l'eau libre. On peut définir empiriquement, et mesurer, un coefficient de diffusion moléculaire, dit effectif, D^* (L^2T^{-1}) qui tient compte de ce phénomène et qui est associé au coefficient en eau libre D_d (L^2T^{-1}). En outre le coefficient dépend de la nature de l'ion, de la température, de la pression et de la composition du fluide.

1.2.6 Dispersion hydrodynamique et opérateur de transport

Dans la pratique, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique concourent toutes deux à la même observation qu'est l'uniformisation de la concentration du soluté. C'est pourquoi elles sont généralement décrites par une équation unique, loi de diffusion de Fick, avec un coefficient de diffusion commun, le tenseur $\bar{\bar{D}}$ appelé coefficient de dispersion hydrodynamique (L^2T^{-1}), regroupant le coefficient de diffusion moléculaire et la dispersion cinématique :

$$\bar{\bar{D}} = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad D_L = \alpha_L \|\mathbf{V}\| + D^* \quad \text{et} \quad D_T = \alpha_T \|\mathbf{V}\| + D^*$$

Ce qui s'écrit encore :

$$\bar{\bar{D}} = D^* \bar{\bar{I}} + \|\mathbf{V}\| \left[\alpha_L \bar{\bar{E}}(\mathbf{V}) + \alpha_T \left(\bar{\bar{I}} - \bar{\bar{E}}(\mathbf{V}) \right) \right] \quad \text{avec} \quad E_{i,j} = \frac{V_i V_j}{\|\mathbf{V}\|^2}$$

La variation de la concentration dans le temps et l'espace due uniquement à la dispersion hydrodynamique dans un milieu poreux s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{dispersion} = \nabla \left(\bar{\bar{D}} \nabla C \right)$$

On peut ainsi écrire l'équation générale du transport d'une espèce par convection-diffusion dans un milieu poreux avec un terme source Q ($ML^{-3}T^{-1}$) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \left(\bar{\bar{D}} \nabla C - \mathbf{V} C \right) + Q$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

On réduira cette écriture en introduisant l'opérateur de transport $L(C)$:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = Q \quad \text{avec} \quad L(C) = -\nabla\left(\bar{\bar{D}}\nabla C - \mathbf{V}C\right)$$

1.2.7 Sorption et transport

Le cas idéal de la convection-diffusion pure est rarement rencontré en pratique, il est par exemple fréquent que le soluté interagisse avec la matrice du milieu poreux, on parle alors de sorption. Il existe différents phénomènes de sorption, on peut citer pour exemple l'adsorption, qui consiste en l'accumulation d'éléments sur l'interface entre la solution et le solide, ou encore la chimisorption dans laquelle le soluté est incorporé sur un sédiment par une réaction chimique (voir [WMK91] pour une revue de ces phénomènes et de leurs modélisations). La modélisation de ces phénomènes peut mener à des équations assez complexes. Cependant, lorsque les concentrations de soluté sont très faibles comme c'est le cas dans la problématique d'un site de stockage géologique des déchets radioactifs, des modèles simples peuvent être formulés en rajoutant un terme source dans l'équation de transport :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = Q_{sorption}(C) \tag{1.1}$$

Sous les hypothèses de très faible concentration et d'une cinétique quasi instantanée de la réaction de sorption, ce terme source peut être heuristiquement approximé par :

$$Q_{sorption}(C) = -\frac{\rho_s}{\omega} K_d \frac{\partial C}{\partial t}$$

avec ρ_s la masse volumique du milieu poreux, ω sa porosité et K_d le coefficient de sorption ($M^{-1}L^3$) qui est caractéristique de la réaction de sorption, ce coefficient est nul en l'absence de tout phénomène de sorption, positif sinon. Avec l'approximation ci-dessus, l'équation (1.1) peut donc s'écrire comme une équation de convection-diffusion sans terme source, mais où apparaît un facteur de retard constant, R_0 :

$$R_0 \frac{\partial C}{\partial t} + L(C) = 0 \quad \text{avec} \quad R_0 = 1 + \frac{\rho_s}{\omega} K_d$$

Grâce aux simplifications ci-dessus, la sorption se ramène donc à un phénomène de retard : il y a une réduction de la vitesse apparente du soluté. De nombreux travaux, tant expérimentaux que théoriques, sont en cours pour valider ou invalider ces diverses mais importantes simplifications.

1.2.8 Dégradation spontanée des composés radioactifs

Un élément radioactif possède un noyau instable susceptible de se scinder en deux, ce qui produit deux nouveaux atomes, eux-mêmes potentiellement instables. La scission d'un noyau atomique est un phénomène aléatoire, plus précisément, la probabilité de désintégration d'un atome sur un temps donné est proportionnel à ce temps. Le coefficient de proportionnalité étant caractéristique de l'élément. A l'échelle macroscopique, l'évolution de la concentration d'un élément radioactif résulte d'une moyenne sur la désintégration aléatoire de chaque atome. Cette évolution suit donc une loi déterministe :

$$\frac{dC_{radioactif}}{dt} = -\lambda C_{radioactif}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

avec λ la constante de dégradation de l'élément (T^{-1}). On définit aussi la période de l'élément (T), $T = \frac{\log(2)}{\lambda}$, qui correspond au temps nécessaire pour que la concentration soit réduite de moitié.

L'équation de transport pour un composé radioactif intègre donc ce phénomène de dégradation spontanée et se réécrit :

$$R_0 \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C \right) + L(C) = 0$$

soit, en présence d'un terme source :

$$R_0 \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C \right) - \nabla \left(\bar{\bar{D}} \nabla C - \mathbf{V} C \right) = Q \tag{1.2}$$

Cette dernière équation constitue un des modèles en champ lointain du transport de radionucléides en milieux poreux qui est utilisé pour l'évaluation de la fiabilité d'un site de stockage géologique profond. Les hypothèses essentielles dans l'élaboration de ce modèle physique ont été : la saturation en liquide du milieu poreux ; une très faible concentration dans le milieu ; et une réaction de sorption quasi instantanée. C'est dans ce cadre que nous nous situerons désormais et nous utiliserons donc systématiquement l'équation (1.2) pour modéliser la migration d'un radionucléide dans les sols.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 2

De la théorie...

La migration des radionucléides dans un milieu poreux a été présentée dans le chapitre précédent comme un phénomène déterministe. On a vu cependant que l'introduction d'un comportement probabiliste du relâchement des radionucléides permettait une meilleure description d'un site de stockage géologique.

Ce chapitre présente les résultats des travaux effectués par A. Bourgeat et A. Piatnitski, publiés dans [BP08], qui traitent de l'homogénéisation d'une équation de convection-diffusion avec un second membre aléatoire dans une configuration de stockage.

La première section introduit la formalisation mathématique du problème : configuration périodique sur un hyperplan du support des termes sources et introduction de la structure à deux échelles ; modélisation de l'aléa des termes sources ; description des équations stochastiques à deux échelles. La seconde section expose les résultats théoriques obtenus dans [BP08] : convergence du problème à deux échelles et estimation de la vitesse de convergence ; convergence en loi des "petites" variations aléatoires autour de la limite. La fin de ce chapitre propose une interprétation et une analyse pratique de ces résultats.

2.1 Formalisation du problème

2.1.1 Description de la géométrie

On considère un domaine ouvert borné $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$, avec $d = 2$ ou $d = 3$, tel que $\mathcal{D}^+ = \{x = (x_1, \cdots, x_d) \in \mathcal{D} : x_d > 0\}$ et $\mathcal{D}^- = \{x = (x_1, \cdots, x_d) \in \mathcal{D} : x_d < 0\}$ soient non vides. Notons $L > 0$ la longueur caractéristique de la zone stockage contenant les sources et supposons que $\mathcal{D}$ contient $\Sigma = [0; L]^{d-1} \times \{0\}$ (voir Figure 2.1). On note enfin ε le réel strictement positif qui représente le rapport entre l'échelle "locale", une source, et l'échelle "globale", la zone de stockage ; en suivant cette dénomination, on parlera de "variable globale", $x = (x_1, \cdots, x_d)$, et de "variable locale" $x/\varepsilon = (x_1/\varepsilon, \cdots, x_d/\varepsilon)$.

On définit K^ε le support d'une source dans la variable locale (voir Figure 2.2) par :

$$K^\varepsilon = [0; s_1] \times \cdots \times [0; s_{d-1}] \times [-\varepsilon^{\gamma-1} s_d/2; \varepsilon^{\gamma-1} s_d/2], \tag{2.1}$$

avec $0 < s_i < 1$ pour $i \in \{1, \cdots, d-1\}$ et $\gamma > 0$. Ensuite, on réalise un pavage à l'aide de la cellule élémentaire K^ε pour obtenir un support périodique, d'extension infinie, qui est donné par :

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= \bigcup_{\mathbf{i} \in \mathbb{N}^{d-1}} K^\varepsilon + (\mathbf{i}, 0) \quad \text{, dans la variable locale, et} \\ \tilde{B}^\varepsilon &= \bigcup_{\mathbf{i} \in \mathbb{N}^{d-1}} \varepsilon L(K^\varepsilon + (\mathbf{i}, 0)) \quad \text{, dans la variable globale.} \end{aligned}$$

Le support de l'ensemble des sources consiste en la restriction du pavage $\tilde{B}^\varepsilon$ à la zone de stockage. Dans le cas $d = 2$, la zone de stockage correspond simplement à N sources alignées ; dans le cas $d = 3$, on considérera pour simplifier que la zone de stockage consiste en un pavage de N sur N sources (voir Figure 2.3). Ici ε mesure la période, sans dimension, du support de l'ensemble des sources et on supposera pour simplifier que $1/\varepsilon = N \in \mathbb{N}$. Le support de l'ensemble des sources est défini, dans la variable globale, par :

$$B^\varepsilon = \tilde{B}^\varepsilon \cap \mathcal{S} = \bigcup_{\mathbf{i}\in I} \varepsilon L(K^\varepsilon + (\mathbf{i}, 0)), \tag{2.2}$$

avec $\mathcal{S} = [0; L]^{d-1} \times \mathbb{R}$, le cylindre vertical ayant pour base la zone de stockage, et $I = \{1, \cdots, N\}^{d-1}$, l'ensemble des indices des sources. Défini ainsi, B^ε contient N^{d-1} sources distinctes. Dans la suite on utilisera aussi la notation

$$B^\varepsilon_{\mathbf{i}} = \varepsilon L(K^\varepsilon + (\mathbf{i}, 0))$$

pour désigner le support de la source indicée par $\mathbf{i} \in I$.

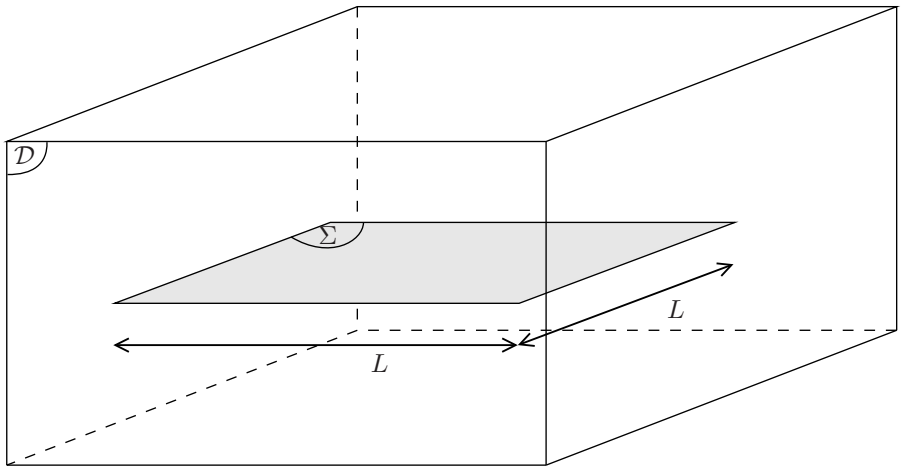


FIGURE 2.1 – Domaine globale

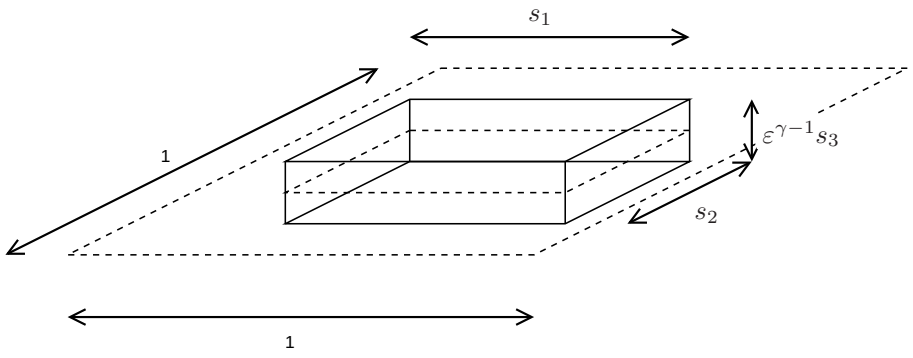


FIGURE 2.2 – Une source en variable locale

2.1.2 Description de l'aléa

L'objectif est de proposer un cadre formel décrivant l'aléa sur les sources. On considère dans la suite $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ un espace de probabilité standard. Une première hypothèse est que

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

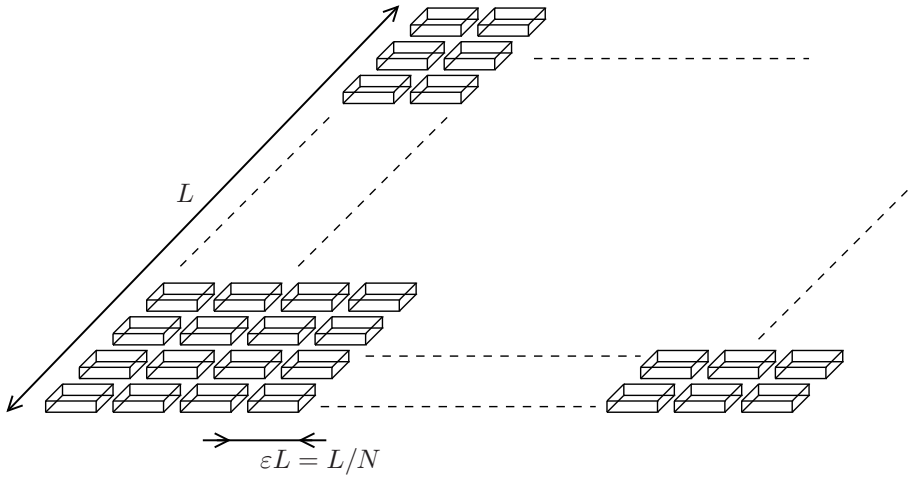


FIGURE 2.3 – Configuration globale des sources

chaque source $\mathbf{i}$, où $\mathbf{i} \in I$, a un comportement spatialement uniforme sur son support $B^\varepsilon_{\mathbf{i}}$. La contribution de la source $\mathbf{i}$ au terme source total peut alors s'écrire sous la forme $f_{\mathbf{i}}(\omega,t)\mathbb{1}_{B^\varepsilon_{\mathbf{i}}(x)}$ où $(t,x) \in \mathbb{R}\times\mathcal{D}$. Ici, $\mathbb{1}_{\mathcal{B}} : \mathcal{E} \to \{0,1\}$ désigne, pour tout ensemble $\mathcal{E}$, la fonction indicatrice du sous ensemble $\mathcal{B} \subset \mathcal{E}$. Pour $\omega \in \Omega$ donné, $f_{\mathbf{i}}(\omega,\cdot)$ correspond à une réalisation de la fonction de relâchement de la source $\mathbf{i}$. Une seconde hypothèse est que les sources sont de même "nature", pour traduire cela on introduit la famille $(\mathcal{T}_{\mathbf{i}})_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^{d-1}}$ d'applications mesurables de Ω dans Ω qui nous permet d'écrire, sans perte de généralité, $f_{\mathbf{i}}(\omega,t)$ sous la forme $f_{\mathbf{i}}(\omega,t) \equiv f(\mathcal{T}_{\mathbf{i}}\omega,t)$. Cette écriture va nous permettre de décrire aisément la dépendance spatiale (selon $\mathbf{i}$) de l'aléa des sources. Elle fait de plus apparaître $f(\cdot,t)$ qui sera un "représentant" du comportement stochastique des $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$ dans le cas où ils suivent tous la même loi de probabilité indépendamment de $\mathbf{i}$.

La situation la plus simple dans la perspective de l'homogénéisation du terme source tel qu'il a été présenté est de considérer $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$ comme un processus stationnaire ergodique en espace. Pour cela on considère $(\mathcal{T}_{\mathbf{i}})_{\mathbf{i}\in\mathbb{Z}^{d-1}}$ comme un système dynamique ergodique sur l'espace de probabilité $(\Omega,\mathcal{F},\mathbf{P})$. Rappelons que, par définition, $(\mathcal{T}_{\mathbf{i}})$ est un système dynamique ergodique si c'est une famille d'application mesurable $\mathcal{T}_{\mathbf{i}}) : \Omega \to \Omega$ telle que $(\mathcal{T}_{\mathbf{i}})$:

- a la propriété de groupe, *i.e.* $\mathcal{T}_{\mathbf{i}_1+\mathbf{i}_2} = \mathcal{T}_{\mathbf{i}_1} \circ \mathcal{T}_{\mathbf{i}_2}$ pour tout $\mathbf{i}_1,\mathbf{i}_2 \in \mathbb{Z}^{d-1}$ et $\mathcal{T}_0 = \mathrm{Id}$;
- préserve la mesure $\mathbf{P}$ pour tout $\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^{d-1}$, *i.e.* $\mathbf{P}(\mathcal{T}_{\mathbf{i}}^{-1}(\mathcal{A})) = \mathbf{P}(\mathcal{A})$ pour tout $\mathcal{A} \in \mathcal{F}$;
- est ergodique, *i.e.* pour tout $\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^{d-1}$, si $\mathcal{A} \in \mathcal{F}$ est invariant par $\mathcal{T}_{\mathbf{i}}$ (c'est-à-dire $\mathcal{A} \subset \mathcal{T}_{\mathbf{i}}^{-1}(\mathcal{A})$) alors $\mathbf{P}(\mathcal{A})(1-\mathbf{P}(\mathcal{A})) = 0$.

On montre facilement que la seconde propriété implique que tous les $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$ suivent la même loi que $f(\cdot,t)$ et qu'en y ajoutant la première propriété le processus $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$ est fortement stationnaire en espace, au sens où toute loi jointe des $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$ sur un sous ensemble fini $\{\mathbf{i}_1,\cdots,\mathbf{i}_n\} \subset \mathbb{Z}^{d-1}$ est identique à la loi jointe prise sur $\{\mathbf{i}_1+\mathbf{h},\cdots,\mathbf{i}_n+\mathbf{h}\}$ pour tout $\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^{d-1}$. La troisième propriété implique l'ergodicité spatiale du processus stochastique stationnaire $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$, c'est-à-dire que la moyenne en espace de $f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)$ coïncide avec son espérance probabiliste : pour tout $\omega \in \Omega$, on a

$$\lim_{n\to\infty}\left(\frac{1}{(2n+1)^{d-1}}\sum_{\mathbf{i}\in[\![-n;n]\!]^{d-1}} f_{\mathbf{i}}(\omega,t)\right) = \mathbf{E}[f(\cdot,t)]$$

Pour plus de détails sur les processus stochastiques, on pourra consulter l'ouvrage de J.L.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Doob [Doo53].

2.1.3 Description des équations

On considère l'équation d'évolution de la concentration d'une espèce radioactive dans un milieu poreux telle qu'elle est présentée en (1.2). On supposera dans la suite, sans que cela nuise à la généralité des résultats, qu'il n'y a pas de phénomène de sorption. On notera : u^ε le champ scalaire sur $[0;T]\times\mathcal{D}$ représentant la concentration de l'espèce radioactive ; λ la constante positive représentant la constante de dégradation de l'élément radioactif ; a la fonction matricielle sur $\mathcal{D}$ régulière et uniformément symétrique définie positive représentant le tenseur de diffusion hydrodynamique ; $\mathbf{b}$ le champ vectoriel régulier et de divergence nulle représentant la vitesse de Darcy du fluide ; et Q^ε le champ scalaire sur $[0;T]\times\mathcal{D}$ représentant la source volumique de radionucléides. On notera de plus $T>0$ le temps final, $\mathbf{n}$ la normale sortante du domaine $\mathcal{D}$ et Γ_d un sous ensemble de la frontière du domaine $\partial\mathcal{D}$. L'évolution de la concentration en radionucléide est alors décrite, pour un terme source déterministe, par le problème de convection-diffusion suivant :

$$\partial_t u^\varepsilon - \nabla(a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon) + \lambda u^\varepsilon = Q^\varepsilon \qquad \text{sur} \quad [0;T]\times\mathcal{D} \tag{2.3a}$$

$$u^\varepsilon = 0 \qquad \text{sur} \quad \{0\}\times\mathcal{D} \tag{2.3b}$$

$$(a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon)\cdot\mathbf{n} = 0 \qquad \text{sur} \quad [0;T]\times(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_d) \tag{2.3c}$$

$$u^\varepsilon = 0 \qquad \text{sur} \quad [0;T]\times\Gamma_d \tag{2.3d}$$

Un résultat classique nous donne que, pour tout $\varepsilon>0$ donné, le problème 2.3 admet une unique solution $u^\varepsilon \in L^2(0,T;H^1(\mathcal{D}))\cap C(0,T;L^2(\mathcal{D}))$ (voir par exemple [BGM04]). Dans la suite, afin d'alléger l'écriture de l'équation (2.3a), on utilisera l'opérateur différentiel linéaire A définit par :

$$Au \equiv -\nabla\left(a\nabla u - \mathbf{b}u\right) + \lambda u$$

L'indice ε, qui représente le rapport entre les échelles locale et globale, porté par u^ε et Q^ε nous rappelle la structure du second membre Q^ε. Dans le cas de l'homogénéisation de termes sources déterministes (voir [BGMP02]) le terme source est considéré de la forme :

$$Q^\varepsilon(t,x) = \frac{1}{\varepsilon^\gamma} f(t)\mathbb{1}_{B^\varepsilon}$$

où B^ε est défini par (2.2), c'est-à-dire que toutes les sources ont la même fonction de relâchement, $f(t)$. La pondération $\frac{1}{\varepsilon^\gamma}$ permet ici de garantir que la quantité totale de l'espèce relâchée au temps t ne dégénère pas, *i.e.* ne tend pas vers zéro ou l'infini, pas quand ε tend vers zéro. Ici on s'intéresse à la situation où le second membre est aléatoire : Q^ε, et donc u^ε, sont alors des champs scalaires aléatoires, c'est-à-dire définis sur $\Omega\times[0;T]\times\mathcal{D}$. En suivant l'usage, on ne montrera pas toujours explicitement la dépendance à $\omega\in\Omega$. Ainsi, en accord avec le cas déterministe, on considèrera Q^ε de la forme :

$$Q^\varepsilon(t,x) = \frac{1}{\varepsilon^\gamma} f(\mathcal{T}_{[x'/L\varepsilon]}\omega, t)\mathbb{1}_{B^\varepsilon} \tag{2.4}$$

où x' désigne la restriction à $\mathbb{R}^{d-1}$ de x :

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{R}^d & \longrightarrow & \mathbb{R}^{d-1} \\ x=(x_1,\cdots,x_d) & \longrightarrow & x'=(x_1,\cdots,x_{d-1})\ ; \end{array}$$

où $[\cdot]$ désigne fonction partie entière étendue à $\mathbb{R}^p$ par :

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{R}^p & \longrightarrow & \mathbb{Z}^p \\ y & \longrightarrow & [y]=([y_1],\cdots,[y_p]) \end{array}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

avec $[y_i]$ la fonction partie entière classique sur $\mathbb{R}$; et où $f : \Omega \times [0;T] \to \mathbb{R}$ et $\mathcal{T}_{\mathbf{i}}$ sont définis dans la section précédente. On supposera de plus que la fonction aléatoire $f(\omega,t)$ est uniformément bornée, *i.e.* il existe deux constantes strictement positives non aléatoires Λ et C_0 telles que

$$\forall \omega \in \Omega \quad \forall t \in [0;T] \qquad |f(\omega,t)| < C_0 e^{-\Lambda t} \tag{2.5}$$

Dans le cas du stockage d'espèce radioactive, cette hypothèse n'est pas contraignante car il est toujours possible de prendre $\Lambda = \lambda$ (voir section 3.2.1).

Le problème de convection-diffusion avec second membre aléatoire que l'on considère est donc le suivant :

$$\partial_t u^\varepsilon - \nabla(a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon) + \lambda u^\varepsilon = Q^\varepsilon \qquad \text{sur} \quad \Omega \times [0;T] \times \mathcal{D} \tag{2.6a}$$

$$u^\varepsilon = 0 \qquad \text{sur} \quad \Omega \times \{0\} \times \mathcal{D} \tag{2.6b}$$

$$(a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon)\cdot \mathbf{n} = 0 \qquad \text{sur} \quad \Omega \times [0;T] \times (\partial\mathcal{D} \setminus \Gamma_d) \tag{2.6c}$$

$$u^\varepsilon = 0 \qquad \text{sur} \quad \Omega \times [0;T] \times \Gamma_d \tag{2.6d}$$

Dans la suite, on qualifiera ce problème de "détaillé" par opposition au problème limite, ou "homogénéisé", issu de l'homogénéisation où l'échelle locale a disparue.

2.2 Homogénéisation du problème aléatoire

On présente ici les résultats théoriques d'homogénéisation du problème (2.6) qui ont été établis dans [BP08]. Plus précisément, dans la première section, le théorème 1 donne la convergence de la solution aléatoire, u^ε, du problème détaillé vers une limite déterministe, u^0, solution d'un problème similaire à (2.3) mais avec seulement une source "singulière" de support Σ. Le théorème 2 donne en plus une estimation de la vitesse de cette convergence. Dans la seconde section, sous des hypothèses de mixing sur l'aléa du terme source, les théorèmes 3 et 4 donnent la convergence en loi du terme correcteur, c'est à dire du champ aléatoire $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon - u^0)$, vers un champ gaussien et en déterminent les paramètres.

2.2.1 Convergence vers une limite déterministe

Notons $\delta_\Sigma(x)$ la mesure de Lebesgue surfacique de support Σ et $\mathbf{E}[f(\cdot,t)]$ la moyenne de $f(\omega,t)$. On définit de plus l'application $F : [0;T] \to \mathbb{R}$ par :

$$F(t) = \left(\prod_{i=1}^{d} s_i\right) L\mathbf{E}[f(\cdot,t)]$$

Il est établi dans [BP08] que la solution aléatoire u^ε du problème détaillé 2.6 converge presque sûrement, quand $\varepsilon \to 0$, vers une limite déterministe u^0 solution du problème de convection-diffusion suivant :

$$\partial_t u^0 + Au^0 = F(t)\delta_\Sigma(x) \quad \text{sur} \quad [0;T] \times \mathcal{D} \tag{2.7a}$$

$$u^0 = 0 \quad \text{sur} \quad \{0\} \times \mathcal{D} \tag{2.7b}$$

$$(a(x)\nabla u^0 - \mathbf{b}(x)u^0)\cdot \mathbf{n}(x) = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T] \times (\partial\mathcal{D} \setminus \Gamma_d) \tag{2.7c}$$

$$u^0 = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T] \times \Gamma_d \tag{2.7d}$$

Plus précisément, on a le théorème suivant :

Théorème 1. *Sous les hypothèses de la section 2.1, on a*

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \|u^\varepsilon - u^0\|_{L^2(0,\infty;H^1(\mathcal{D}))} = 0 \quad p.s.$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Sous des hypothèses supplémentaires sur la décroissance de la corrélation spatiale du terme source, ce résultat de convergence peut être complété par une estimation de la vitesse de convergence. Pour cela, on introduit

$$R : [0,T] \times [0,T] \times \mathbb{R}^{d-1} \times \mathbb{R}^{d-1} \to \mathbb{R}$$

la fonction de corrélation du processus f dans la variable locale défini, pour tout $t, s \in [0;T]$ et $x, y \in \mathbb{R}^d$, par :

$$R(t,s,x',y') = \mathbf{E}\left[(f(\mathcal{T}_{[x']}\cdot,t) - \mathbf{E}[f(\mathcal{T}_{[x']}\cdot,t)])(f(\mathcal{T}_{[y']}\cdot,s) - \mathbf{E}[f(\mathcal{T}_{[y']}\cdot,s)])\right] \tag{2.8}$$

En accord avec la stationnarité spatiale du processus f et avec l'hypothèse (2.5), on supposera, sans perte de généralité, qu'il existe $\bar{R} : \mathbb{R}^{d-1} \to \mathbb{R}_+$ tel que

$$\forall t, s \in [0;\infty[\quad \forall x, y \in \mathbb{R}^d \qquad |R(t,s,x',y')| \leq e^{-\Lambda \min(t,s)} \bar{R}(x'-y')$$

On définit les hypothèses suivantes sur $\bar{R}(y')$:

H1. *Il existe $R_0 > 0$ tel que*

$$\bar{R}(y') = 0 \quad \text{si } |y'| > R_0$$

H2.

$$\int_{\mathbb{R}^{d-1}} \bar{R}(y')dy' < \infty$$

H3. *Il existe $C_R > 0$ et $\nu > 2$ tels que*

$$\bar{R}(y') \leq C_R(1+|y'|)^{-\nu}$$

Théorème 2. *Sous les hypothèses du théorème 1 et sous la condition supplémentaire* **H1**, **H2** *ou* **H3**, *on a*

$$\mathbf{E}\left[\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right] \leq C_1(\varepsilon^2 + \varepsilon^{2\gamma}) \tag{2.9}$$

avec C_1 une constante positive indépendante de ε.

2.2.2 Convergence en loi

Le théorème 1 fournit le comportement "moyen" et homogénéisé, u^0, de u^ε. Il est possible d'enrichir ce résultat en caractérisant le comportement limite des fluctuations aléatoires de u^ε autour de u^0. Par analogie avec le théorème de la limite centrale, on peut montrer que, pour N le nombre de sources, le champ aléatoire $\sqrt{N}(u^\varepsilon - u^0)$ converge en loi vers un champ gaussien. Ici $N = \varepsilon^{d-1}$ (voir la section 2.1.1), c'est donc la limite de $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t,x) - u^0(t,x))$ que l'on étudie.

Considérons les hypothèses suivantes, où on note pour simplifier $\tilde{f}(t,x') \equiv f(\mathcal{T}_{[x']}\cdot,t)$:

H4. *Pour tout $t_0 \geq 0$ le coefficient de mélange fort ("strong mixing cefficient") $\alpha_{t_0}(s)$ de $\tilde{f}$ décroit suffisamment vite pour que*

$$\exists \nu_1 > 2 \quad \exists C_2 > 0 \quad \exists \Lambda_1 > 0 \quad \forall s > 0 \quad \alpha_{t_0}(s) < C_2 e^{\Lambda_1 t_0}(1+s)^{-\nu_1}$$

Où $\alpha_{t_0}(s)$ est défini comme suit

$$\alpha_{t_0}(s) = \sup_{G_1,G_2} \sup_{\substack{\mathcal{E}_1 \in \mathcal{F}_{G_1} \\ \mathcal{E}_2 \in \mathcal{F}_{G_2}}} |\mathbf{P}(\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2) - \mathbf{P}(\mathcal{E}_1)\mathbf{P}(\mathcal{E}_2)|$$

avec $\mathcal{F}_{G_1}$ et $\mathcal{F}_{G_2}$ les σ-algebres suivantes : $\mathcal{F}_{G_1} = \sigma\{\tilde{f}(t_1,y_1') : y_1' \in G_1, t_1 \geq t_0\}$, $\mathcal{F}_{G_2} = \sigma\{\tilde{f}(t_2,y_2') : y_1' \in G_2, t_2 \geq t_0\}$ (see [Doo53]). La première borne supérieure est prise sur tous les ensemble $G_1, G_2 \subset \mathbb{R}^2$ tels que $\text{dist}(G_1,G_2) \geq s$.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

H5. *Pour tout $t_0 \geq 0$ le coefficient de corrélation maximum $\beta_{t_0}(s)$ de $\tilde{f}$ décroit suffisamment vite que que*

$$\exists \nu_2 > 2 \quad \exists C_3 > 0 \quad \exists \Lambda_2 > 0 \quad \forall s > 0 \quad \beta_{t_0}(s) < C_3 e^{\Lambda_2 t_0}(1+s)^{-\nu_2}$$

avec

$$\beta_{t_0}(s) = \sup_{G_1, G_2} \sup_{\xi, \mu} |\mathbf{E}(\xi\mu)|$$

La seconde borne supérieure est prise sur toutes les variables aléatoire ξ et μ qui sont respectivement $\mathcal{F}_{G_1}$- and $\mathcal{F}_{G_2}$-mesurable et satisfont les conditions $\mathbf{E}\xi = \mathbf{E}\mu = 0$ et $\|\xi\|_{L^\infty(\Omega)} = \|\mu\|_{L^\infty(\Omega)} = 1$. La première borne supérieure est prise sur tous les ensembles $G_1, G_2 \subset \mathbb{R}^2$ tels que $\mathrm{dist}(G_1, G_2) \geq s$.

H6. *Il existe $\psi : [0;T] \to \mathbb{R}$ et $\lambda : \Omega \to \mathbb{R}$ tels que*

$$f(\omega, t) = \lambda(\omega)\psi(t)$$

H7. *Pour tout $(t,s) \in [0;T]^2$ et pour tout $(x,y) \in \mathcal{D}^2$,*

$$R(t, s, x', y') = 0 \quad si\ [x'] \neq [y']$$

Notons de plus, pour $(t,s) \in [0;T]^2$ et $(x,y) \in \mathcal{D}^2$, $G(t,s,x,y)$ la fonction de Green associée au problème (2.3) et définissons

$$\bar{\bar{c}}(t,s) \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{s_d^2 L^{d+1}}{N^{d-1}} \int_{[0,N]^{d-1}} \int_{[0,N]^{d-1}} R(t,s,y',z') \mathbb{1}_{\tilde{B}}(y') \mathbb{1}_{\tilde{B}}(z') dy' dz' \tag{2.10}$$

Un premier résultat concerne la convergence en loi de la variable aléatoire, scalaire, $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t,x) - u^0(t,x))$ pour $(t,x) \in [0;T] \times \mathcal{D}$ donné. Plus précisément, on a le théorème suivant (voir [BP08]) :

Théorème 3. *Supposons la condition* **H4** *ou* **H5** *satisfaite. Alors pour tout $t \in [0;T]$ et $x \in \mathcal{D} \setminus \Sigma$, la différence normalisée $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t,x) - u^0(t,x))$ converge en loi vers une variable aléatoire gaussienne de moyenne nulle et de covariance σ^2 donnée par :*

$$\sigma^2(t,x) = \int_0^t \int_0^t \int_\Sigma G(t,s,x,y') G(t,r,x,y') \bar{\bar{c}}(s,r) dy' ds dr \tag{2.11}$$

Pour aller plus loin, on rappelle qu'un champ aléatoire, $u : \Omega \times \mathcal{A} \to \mathbb{R}$, est dit gaussien quand, pour tout sous ensemble fini $\{x_1, \cdots, x_k\}$ de $\mathcal{A}$, le vecteur aléatoire $(u(x_1), \cdots, u(x_k))^t : \Omega \to \mathbb{R}^k$ est gaussien. C'est pourquoi le théorème suivant, qui établit la convergence en loi du vecteur aléatoire $(\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t^j, x^j) - u^0(t^j, x^j)))_{j=1,\cdots,k}$ vers un vecteur gaussien, permet de conclure que $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon - u^0)$ converge en loi vers un champ gaussien.

Théorème 4. *Supposons la condition* **H6** *satisfaite. Alors pour tout sous ensemble*

$$\{(t^1, x^1), \cdots, (t^k, x^k)\} \subset \mathbb{R}_+ \times (\mathcal{D} \setminus \Sigma)$$

le vecteur aléatoire $(\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t^j, x^j) - u^0(t^j, x^j)))_{j=1,\cdots,k}$ converge en loi vers un vecteur gaussien centré dont la matrice de covariance, $(\sigma^{ij})_{ij}$, est donnée par

$$\sigma^{i,j} = \int_0^{t^i} \int_0^{t^j} \int_\Sigma G(t^i, s, x^i, y') G(t^j, r, x^j, y') \bar{\bar{c}}(s,r) dy' ds dr \tag{2.12}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

2.2.3 Interprétation

Approximation déterministe

Les théorèmes 1 et 2 donnent la limite, u^0, de u^ε quand ε tend vers zéro. Comme d'habitude en homogénéisation, ce résultat sert à justifier qu'on utilise u^0 comme une approximation en champ lointain de u^ε à ε fixé. Cette approximation est motivée par une réduction de la taille du maillage nécessaire à la simulation numérique. En effet, u^0 est solution du problème homogénéisé (2.7) qui ne diffère du problème détaillé (2.6) que par le terme source : $Q^\varepsilon(t,x)$ pour le problème détaillé et $F(t)\delta_\Sigma(x)$ pour le problème homogénéisé. Bien que singulière, la géométrie du terme source homogénéisé requiert un maillage beaucoup moins raffiné que la géométrie du terme source détaillé où chaque source, de taille εL, doit être maillée.

Notons que le fait que le terme source homogénéisé, $F(t)\delta_\Sigma(x)$, soit singulier n'est pas un problème en pratique. En effet, considérons la formulation variationnelle du problème homogénéisé (2.7) (ici de manière formelle mais l'écriture rigoureuse ne pose pas de difficulté), on peut écrire, pour ξ une fonction test :

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{D}} \partial_t u^0 \xi + \int_{\mathcal{D}} (a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon)\nabla\xi + \int_{\mathcal{D}} \lambda u^\varepsilon \xi &= \int_{\mathcal{D}} F(t)\delta_\Sigma(x)\xi \\ &= \int_\Sigma F(t)\xi\end{aligned}$$

On constate que la contribution du terme source homogénéisé s'écrit comme une condition de Neumann, à la différence près que cette l'intégrale ne s'appuie pas sur une partie de la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine mais sur Σ qui se situe dans l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$. Ceci implique que le flux $(a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon)$ de part et d'autre de Σ n'est pas continu, mais au contraire présente un saut. On écrira

$$[a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon]_\Sigma \cdot \mathbf{n}_\Sigma = F(t)$$

où $[\phi]_\Sigma$ désigne le saut du flux ϕ à travers Σ et $\mathbf{n}_\Sigma$ la normale à Σ ; ces deux quantités sont définies à un signe près, il faut donc les prendre dans le même sens. Finalement, le problème homogénéisé (2.7) peut s'écrire

$$\partial_t u^0 + Au^0 = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T]\times\mathcal{D} \tag{2.13a}$$
$$u^0 = 0 \quad \text{sur} \quad \{0\}\times\mathcal{D} \tag{2.13b}$$
$$(a(x)\nabla u^0 - \mathbf{b}(x)u^0)\cdot\mathbf{n}(x) = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T]\times(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_d) \tag{2.13c}$$
$$u^0 = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T]\times\Gamma_d \tag{2.13d}$$
$$[a\nabla u^\varepsilon - \mathbf{b}u^\varepsilon]_\Sigma\cdot\mathbf{n}_\Sigma = F(t) \quad \text{sur} \quad [0;T]\times\Sigma \tag{2.13e}$$

Correcteur aléatoire

Cependant, u^0 est déterministe et ne décrit que le comportement "moyen" de u^ε, approximer u^ε par u^0 revient donc à négliger totalement la nature aléatoire de la solution détaillée. Pour combler ce manque, on introduit la notion de correcteur aléatoire. Il est important de ne pas confondre cette notion de correcteur aléatoire avec la notion, plus "classique", de correcteur d'ordres supérieurs telle qu'elle intervient dans l'homogénéisation de problèmes déterministes. Dans le second cas, il s'agit d'enrichir l'approximation d'ordre zéro issue du processus d'homogénéisation par une approximation d'ordre un, ou plus, des oscillations *spatiales* de la solution détaillée déterministe. Tandis qu'ici, il s'agit

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

d'approximer les fluctuations *aléatoires* de la solution détaillée aléatoire autour de la solution homogénéisée déterministe. En effet, définissons, pour $(t,x) \in [0;T] \times \mathcal{D} \setminus \Sigma$ donné, la variable aléatoire $\bar{u}^\varepsilon(t,x)$ par

$$\bar{u}^\varepsilon(t,x) = u^0(t,x) + \varepsilon^{(d-1)/2}\sigma(t,x)X(\omega) \tag{2.14}$$

où $X(\omega)$ est une variable aléatoire qui suit la loi normale centrée réduite (espérance nulle et variance égale un) et où $\sigma(t,x)$ est défini par la relation (2.11). Alors le théorème 3 nous dit que la loi limite, quand ε tend vers zéro, de $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t,x) - u^0(t,x))$ est la même que la loi suivie par $\varepsilon^{-(d-1)/2}(\bar{u}^\varepsilon(t,x) - u^0(t,x))$ à ε fixé. C'est en ce sens que l'on considèrera que, à ε fixé, $\bar{u}^\varepsilon(t,x)$ est une approximation en loi de $u^\varepsilon(t,x)$. Dans la relation (2.14) le terme $\varepsilon^{(d-1)/2}\sigma(t,x)X(\omega)$ sera appelé correcteur aléatoire.

En définissant $\bar{u}^\varepsilon$ selon la relation (2.14), on ne considère l'aléa du champ aléatoire u^ε que point par point (entendre ici les points "temps-espace" (t,x)). En faisant cela, on ignore la structure spatio-temporelle de cet aléa, par exemple la corrélation de u^ε entre deux points "temps-espace". Le théorème 4, qui établit la convergence en loi du champ aléatoire $\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon - u^0)$, nous permet de prendre en compte cette structure. Considérons $\{(t^1,x^1),\cdots,(t^k,x^k)\}$ un sous ensemble de $\mathbb{R}_+ \times (\mathcal{D}\setminus\Sigma)$ et X un vecteur aléatoire de taille k dont les composantes $(X_i)_{i=1\cdots k}$ sont des variables aléatoires indépendantes suivant toutes une loi normale centrée réduite, on définit alors $\bar{u}^\varepsilon$ par

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \bar{u}^\varepsilon(t^i,x^i) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ u^0(t^i,x^i) \\ \vdots \end{pmatrix} + \varepsilon^{(d-1)/2}\Gamma X \tag{2.15}$$

où Γ est une matrice de taille $k \times k$ telle que $(\Gamma\Gamma^t)_{i,j} = \sigma^{i,j}$ et où $\sigma^{i,j}$ est défini par la relation (2.12). De la même manière que précédemment, le théorème 4 nous permet de considérer le champ aléatoire $\bar{u}^\varepsilon$ comme une approximation en loi du champ aléatoire u^ε et le terme $\varepsilon^{(d-1)/2}\Gamma X$ joue alors le rôle de correcteur aléatoire.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 3

... à la pratique

DANS ce chapitre, on montre comment on a implémenté en pratique les résultats théoriques de [BP08] rappelés dans le chapitre précédent. La seconde section de ce chapitre présente deux cas test sur lesquels on illustre numériquement les convergences prédites par la théorie. La première section est dédiée à la présentation des méthodes et des notions utilisées pour obtenir ces résultats numériques.

L'application principale des résultats du chapitre 2 est sans doute la possibilité de construire une approximation en loi, issue du processus d'homogénéisation, de la solution du problème aléatoire détaillé (2.6). L'expression de cette approximation est donnée par la relation (2.15) qui fait intervenir la solution déterministe, u^0, du problème homogénéisé (2.7) d'une part et la matrice de covariance σ , définie par la relation (2.12) d'autre part. Si le calcul de u^0 ne pose pas de problème particulier (voir section 2.2.3), celui de σ nécessite un travail spécifique qui est exposé dans les sections 3.1.2 et 3.1.3 (partie "Convolution 2D"). Les considérations développées dans les autres sections sont plus spécifiques à l'observation, par la simulation numérique, des convergences prédites par la théorie. Ainsi, la section 3.1.1 propose une approche pour évaluer, avec un coût raisonnable, la distribution de la solution du problème aléatoire détaillé et la moyenne de l'erreur définie dans le théorème 2. Cette approche faisant intervenir le produit de convolution de fonctions à une ou deux variables, qui ne sont accessibles en pratique que de manière discrète, la section 3.1.3 décrit la construction d'un produit de convolution "discret" en dimension un et deux. La section 3.1.4 est dédiée, quant à elle, à la construction d'une "distance" entre les distributions de deux vecteurs aléatoires.

3.1 Vers le numérique : considérations diverses

3.1.1 Calcul de la distribution et des moments

Dans cette section, on expose une méthode pour calculer "efficacement" la distribution de u^ε, solution de (2.6), ainsi que la moyenne $\mathbf{E}\left[\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right]$, à $\varepsilon > 0$ fixé. Une approche "directe" serait de générer un échantillon (*i.e.* un certain nombre de réalisation) du terme source Q^ε et de simuler les réalisations de u^ε associées. La précision de l'estimation finale de la moyenne de l'erreur dépend alors de la représentativité et de la taille de l'échantillon du terme source. Au vu de la structure en N^{d-1} sources élémentaires du terme source, son échantillonnage doit donc être significativement plus grand que N^{d-1} pour rassembler ses qualités. Malheureusement, cela implique de simuler et de stocker autant de réalisations de u^ε.

Pour éviter ces difficultés numériques tout en conservant un bon échantillonnage, on

développe dans cette section une approche qui, partant de la linéarité du problème (2.6) et de la forme du terme source Q^ε, aboutit à une méthode de calcul de la moyenne de l'erreur entre u^ε et u^0 faisant appel à la résolution de seulement N^{d-1} problèmes de convection-diffusion indépendamment de la taille de l'échantillon du terme source.

"Découplage" temps/espace

Pour simplifier les écritures, on notera dans la suite, pour $\mathbf{i} \in I$, $f_\mathbf{i}(\omega,t) = \frac{1}{\varepsilon^\gamma} f(T_\mathbf{i}\omega, t)$. La relation (2.4) se réécrit alors

$$Q^\varepsilon(t,x) = \sum_{\mathbf{i}\in I} f_\mathbf{i}(\omega,t)\mathbb{1}_{B_\mathbf{i}^\varepsilon}(x)$$

Considérons la famille de problèmes, indicés par $\mathbf{i} \in I$, donnée par

$$\partial_t u_\mathbf{i} + Au_\mathbf{i} = \delta_0(t)\mathbb{1}_{B_\mathbf{i}^\varepsilon}(x) \quad \text{sur} \quad [0;T]\times\mathcal{D} \tag{3.1a}$$

$$u_\mathbf{i} = 0 \quad \text{sur} \quad \{0\}\times\mathcal{D} \tag{3.1b}$$

$$(a(x)\nabla u_\mathbf{i} - \mathbf{b}(x)u_\mathbf{i})\cdot\mathbf{n}(x) = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T]\times(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_d) \tag{3.1c}$$

$$u_\mathbf{i} = 0 \quad \text{sur} \quad [0;T]\times\Gamma_d \tag{3.1d}$$

où $\delta_0(t)$ est la fonction de Dirac dans la variable t. Considérons de plus le champ aléatoire $U : \Omega\times[0;T]\times\mathcal{D}\to\mathbb{R}$ défini par

$$U(\omega,t,x) = \sum_{\mathbf{i}\in I} \tilde{f}_\mathbf{i}(\omega,\cdot) * \tilde{u}_\mathbf{i}(\cdot,x)(t) \tag{3.2}$$

où $*$ désigne le produit de convolution défini, pour deux applications g et $h : \mathbb{R}^p\to\mathbb{R}$, par

$$\begin{array}{rccl} g(\cdot)*h(\cdot) = g*h : & \mathbb{R}^p & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & x & \longrightarrow & \int_{\mathbb{R}^p} g(y)h(x-y)dy \end{array}$$

et où $\tilde{u}_\mathbf{i}(t,x)$ et $\tilde{f}_\mathbf{i}(\omega,t)$ sont les extensions de $u_\mathbf{i}(t,x)$ et de $f_\mathbf{i}(\omega,t)$ respectivement sur $\mathbb{R}\times\mathcal{D}$ et sur $\Omega\times\mathbb{R}$ définies par

$$\tilde{u}_\mathbf{i}(t,x) \equiv \begin{vmatrix} u_\mathbf{i}(t,x) & \text{si } t\in[0;T] \\ 0 & \text{sinon} \end{vmatrix} \quad \text{et} \quad \tilde{f}_\mathbf{i}(\omega,t) \equiv \begin{vmatrix} f_\mathbf{i}(\omega,t) & \text{si } t\in[0;T] \\ 0 & \text{sinon} \end{vmatrix}$$

Afin de simplifier les notations, on assimilera dans la suite $u_\mathbf{i}(t,x)$ et de $f_\mathbf{i}(\omega,t)$ à leurs extensions quand cela à est nécessaire. Alors on a le résultat suivant :

Proposition 1. *$U(\omega,t,x)$ défini par (3.1) et (3.2) est une solution du problème (2.6).*

Démonstration. Pour tout $(\omega,t,x)\in\Omega\times[0;T]\times\mathcal{D}$, on a :

$$\begin{aligned} \partial_t U(\omega,t,x) + AU(\omega,t,x) &= \sum_{\mathbf{i}\in I} \partial_t(f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*u_\mathbf{i}(\cdot,x)(t)) + A(f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*u_\mathbf{i}(\cdot,x)(t)) \\ &= \sum_{\mathbf{i}\in I} f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*\partial_t u_\mathbf{i}(\cdot,x)(t) + f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*Au_\mathbf{i}(\cdot,x)(t) \\ &= \sum_{\mathbf{i}\in I} f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*(\partial_t u_\mathbf{i}(\cdot,x)(t) + Au_\mathbf{i}(\cdot,x)(t)) \\ &= \sum_{\mathbf{i}\in I} f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*(\delta_0(t)\mathbb{1}_{B_\mathbf{i}^\varepsilon}(x)) \\ &= \sum_{\mathbf{i}\in I} (f_\mathbf{i}(\omega,\cdot)*\delta_0(t))\mathbb{1}_{B_\mathbf{i}^\varepsilon}(x) \\ &= \sum_{\mathbf{i}\in I} f_\mathbf{i}(\omega,t)\mathbb{1}_{B_\mathbf{i}^\varepsilon}(x) \\ &= Q^\varepsilon(t,x) \end{aligned}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Donc $U(\omega,t,x)$ vérifie (2.6a). De plus $U(\omega,t,x)$ vérifie (2.6b), (2.6c) et (2.6d), en effet, on a les égalités suivantes :

$$\begin{aligned} U(\omega,0,x) =& \sum_{\mathbf{i}\in I} f_{\mathbf{i}}(\omega,\cdot) * u_{\mathbf{i}}(\cdot,x)(0) \\ =& \sum_{\mathbf{i}\in I} \int_{\mathbb{R}} f_{\mathbf{i}}(\omega,\cdot)(s)\mathbb{1}_{[0;T]}(s)u_{\mathbf{i}}(-s,x)\mathbb{1}_{[0;T]}(-s)ds = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (a\nabla U - \mathbf{b}U)\cdot\mathbf{n} =& \sum_{\mathbf{i}\in I} f_{\mathbf{i}} * (a\nabla u_{\mathbf{i}} - \mathbf{b}u_{\mathbf{i}})\cdot\mathbf{n} \quad \text{sur} \quad [0;T]\times(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_d) \\ =& 0 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} U(\omega,t,x) =& \sum_{\mathbf{i}\in I} f_{\mathbf{i}}(\omega,\cdot) * u_{\mathbf{i}}(\cdot,x)(t) \quad \text{sur} \quad [0;T]\times\Gamma_d \\ =& \sum_{\mathbf{i}\in I} f_{\mathbf{i}}(\omega,\cdot) * 0(t) = 0 \end{aligned}$$

□

Ainsi, l'équation (3.2) fournit une expression de la solution u^ε du problème détaillé (2.6) où les termes aléatoires $f_{\mathbf{i}}(\omega,t)$ apparaissent explicitement. On a en quelque sorte "découpler" ce qui tient du comportement temporel et aléatoire des sources (le terme $f_{\mathbf{i}}(\omega,t)$) et ce qui tient de la dynamique de convection-diffusion et de la géométrie des sources (le terme $u_{\mathbf{i}}(t,x)$). Le premier intérêt de cette expression de la solution détaillée réside dans le calcul de la distribution de u^ε qui ne nécessite plus que la résolution de N^{d-1} équations aux dérivées partielles. On verra dans la section suivante que la relation (3.2) est aussi utile pour le calcul des moments de la solution détaillée.

Premiers moments

Étant donnée la stationnarité en espace du processus $f_{\mathbf{i}}(\omega,t)$, on a, pour $t\in[0;T]$, $\mathbf{E}[f_{\mathbf{i}}(\cdot,t)] = \mathbf{E}[f_{\mathbf{j}}(\cdot,t)] = \mathbf{E}[f(\cdot,t)]$ quelque soit $\mathbf{i},\mathbf{j}\in I$. On notera pour simplifier $\mathbf{E}f(t)\equiv\mathbf{E}[f(\cdot,t)]$. Considérant la relation (3.2), la moyenne de $U(\omega,t,x)$ pour $(t,x)\in[0;T]\times\mathcal{D}$ se calcule simplement :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[U(\cdot,t,x)] =& \sum_{\mathbf{i}\in I} \mathbf{E}[f_{\mathbf{i}}] * u_{\mathbf{i}}(\cdot,x)(t) \\ =& \sum_{\mathbf{i}\in I} \mathbf{E}f * u_{\mathbf{i}}(\cdot,x)(t) \\ =& \mathbf{E}f * \sum_{\mathbf{i}\in I} u_{\mathbf{i}}(\cdot,x)(t) \end{aligned}$$

Ce résultat n'apporte pas grand chose en soi. En effet, puisque U est solution du problème (2.6) qui est linéaire par rapport à l'aléa, on sait déjà que $\mathbf{E}[U]$ est solution du même problème mais où le second membre aléatoire, $Q^\varepsilon(\omega)$, est remplacé par sa moyenne, $\mathbf{E}[Q^\varepsilon]$. Par contre, on va aussi pouvoir calculer les moments de U d'ordre supérieur en utilisant la relation 2.6. Pour cela, on introduit le produit tensoriel $\otimes$, défini pour deux applications $g:\mathbb{R}^p\to\mathbb{R}$ et $h:\mathbb{R}^q\to\mathbb{R}$ par :

$$\begin{array}{rccc} g(\cdot)\otimes h(\cdot) = g\otimes h: & \mathbb{R}^p\times\mathbb{R}^q & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & (x,y) & \longrightarrow & g(x)h(y). \end{array}$$

Rappelons, de plus, la propriété suivante :

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Proposition 2. *Pour* $\left\{ \begin{array}{lccc} a,b: & \mathbb{R}^p & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ c,d: & \mathbb{R}^q & \longrightarrow & \mathbb{R} \end{array} \right.$ *et* $x_1 \in \mathbb{R}^p$, $x_2 \in \mathbb{R}^q$, *on a :*

$$(a * b(x_1))(c * d(x_2)) = (a \otimes c) * (b \otimes d)(x_1, x_2)$$

Pour (t_1, x_1) et $(t_2, x_2) \in [0;T] \times \mathcal{D}$, le second moment de U, $\mathbf{E}[U(\cdot, t_1, x_1)U(\cdot, t_2, x_2)]$, peut se calculer ainsi :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[U(\cdot,t_1,x_1)U(\cdot,t_2,x_2)] =& \mathbf{E}\left[\sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} f_{\mathbf{i}} * u_{\mathbf{i}}(\cdot,x_1)(t_1) f_{\mathbf{j}} * u_{\mathbf{j}}(\cdot,x_2)(t_2)\right] \\ =& \mathbf{E}\left[\sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} (f_{\mathbf{i}} \otimes f_{\mathbf{j}}) * (u_{\mathbf{i}}(\cdot,x_1) \otimes u_{\mathbf{j}}(\cdot,x_2))\,(t_1,t_2)\right] \\ =& \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} \mathbf{E}\left[f_{\mathbf{i}} \otimes f_{\mathbf{j}}\right] * (u_{\mathbf{i}}(\cdot,x_1) \otimes u_{\mathbf{j}}(\cdot,x_2))(t_1,t_2) \\ =& \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} \mathrm{Cov}(f_{\mathbf{i}}, f_{\mathbf{j}}) * (u_{\mathbf{i}}(\cdot,x_1) \otimes u_{\mathbf{j}}(\cdot,x_2))(t_1,t_2) \\ & + \mathbf{E}[U(\cdot,t_1,x_1)]\mathbf{E}[U(\cdot,t_2,x_2)] \end{aligned} \tag{3.3}$$

avec

$$\mathrm{Cov}(f_{\mathbf{i}}, f_{\mathbf{j}})(t_1,t_2) \equiv \mathbf{E}\left[f_{\mathbf{i}}(t_1) f_{\mathbf{j}}(t_2)\right] - \mathbf{E}[f_{\mathbf{i}}(t_1)]\mathbf{E}[f_{\mathbf{j}}(t_2)]$$

Remarquons que la stationnarité spatiale (forte) du processus f implique que sa covariance est inchangée par translation spatiale ; autrement dit, pour tout $(t_1, t_2) \in \mathbb{R}^2$ et $(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \in I^2$, quelque soit $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^{d-1}$ tel que $(\mathbf{i}+\mathbf{k}, \mathbf{j}+\mathbf{k}) \in I^2$, on a $\mathrm{Cov}(f_{\mathbf{i}}, f_{\mathbf{j}})(t_1,t_2) = \mathrm{Cov}(f_{\mathbf{i}+\mathbf{k}}, f_{\mathbf{j}+\mathbf{k}})(t_1,t_2)$.

De la même manière que pour le moment d'ordre deux, on peut calculer les moments d'ordre n de U en utilisant les moments de f jusqu'à l'ordre n et la convolution dans $\mathbb{R}^n$. Dans la suite, on n'aura pas besoin de monter au delà de l'ordre deux.

Moyenne de l'erreur

Il est désormais possible de calculer la quantité $\mathbf{E}\left[\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right]$ qui intervient dans le théorème 2. On peut développer cette moyenne comme suit

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\left[\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right] =& \underbrace{\mathbf{E}\left[\|u^\varepsilon\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right]}_{=I_1} \\ & -2\underbrace{\mathbf{E} < u^\varepsilon, u^0 >_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}}_{=I_2} + \underbrace{\mathbf{E}\left[\|u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right]}_{=I_3} \end{aligned}$$

Le terme I_3 est explicite puisque u^0 est déterministe :

$$I_3 = \|u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}$$

Le terme I_2 se réduit par linéarité à :

$$I_2 = < \mathbf{E}u^\varepsilon, u^0 >_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

En utilisant la relation (3.3), le terme I_1 s'écrit :

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^T \int_{\mathcal{D}} \mathbf{E}\left[u^\varepsilon(t,x)^2\right] dxdt \\ &= \int_0^T \int_{\mathcal{D}} \left[\mathbf{E}[u^\varepsilon(t,x)]^2 + \left(\sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} \mathrm{Cov}(f_\mathbf{i}, f_\mathbf{j}) * (u_\mathbf{i}(\cdot,x) \otimes u_\mathbf{j}(\cdot,x))(t,t)\right)\right] dxdt \\ &= \|\mathbf{E}u^\varepsilon\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))} + \int_0^T \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} \mathrm{Cov}(f_\mathbf{i}, f_\mathbf{j}) * \left(\int_{\mathcal{D}} u_\mathbf{i}(\cdot,x) \otimes u_\mathbf{j}(\cdot,x)dx\right)(t,t)dt \end{aligned}$$

En utilisant le fait que

$$\begin{aligned} \|\mathbf{E}u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))} = \|\mathbf{E}u^\varepsilon\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))} \\ - 2 < \mathbf{E}u^\varepsilon, u^0 >_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))} + \|u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))} \end{aligned}$$

on peut finalement écrire la moyenne de l'erreur comme :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}\left[\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}\right] = \|\mathbf{E}u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))} \\ + \int_0^T \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}\in I} \mathrm{Cov}(f_\mathbf{i}, f_\mathbf{j}) * \left(\int_{\mathcal{D}} u_\mathbf{i}(\cdot,x) \otimes u_\mathbf{j}(\cdot,x)dx\right)(t,t)dt \end{aligned} \quad (3.4)$$

3.1.2 Matrice de covariance : approximation de la fonction de Green

Pour $\{(t^i,x^i)\}_{i=1..k}$ est un sous ensemble fini de $\mathbb{R}_+ \times (\mathcal{D}\setminus\Sigma)$, le théorème 4 définit la matrice de covariance $(\sigma^{i,j})_{i,j=1\cdots k}$, voir (2.12), par

$$\sigma^{i,j} \equiv \sigma(t^i,x^i,t^j,x^j) = \int_0^{t^i}\int_0^{t^j}\int_\Sigma G(t^i,s,x^i,y')G(t^j,r,x^j,y')\bar{\bar{c}}(s,r)dy'dsdr$$

où intervient $G(t,s,x,y)$, la fonction de Green associée au problème (2.3). Rappelons que pour $(s,y)\in[0;T]\times\mathcal{D}$ donné, $G(t,s,x,y)$ peut être défini comme la solution du problème, de paramètre (s,y), suivant

$$\begin{aligned} \partial_t G(t,s,x,y) + AG(t,s,x,y) &= \delta_s(t)\delta_y(x) && \text{sur} \quad [0;T]\times\mathcal{D} && (3.5a)\\ G(t,s,x,y) &= 0 && \text{sur} \quad \{0\}\times\mathcal{D} && (3.5b)\\ (a\nabla G(t,s,x,y) - \mathbf{b}G(t,s,x,y))\cdot\mathbf{n} &= 0 && \text{sur} \quad [0;T]\times(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_d) && (3.5c)\\ G(t,s,x,y) &= 0 && \text{sur} \quad [0;T]\times\Gamma_d && (3.5d) \end{aligned}$$

où $\delta_y(x)$ est la fonction de Dirac spatial en y et $\delta_s(t)$ est la fonction de Dirac temporel en s. Dans le cas général, on ne dispose pas d'une formulation explicite de la fonction de Green et il est alors nécessaire de l'estimer par la résolution numérique du problème 3.5. Pour avoir une connaissance complète de la fonction de Green, il faut que le paramètre (s,y) décrive de manière exhaustive l'ensemble $[0;T]\times\mathcal{D}$. Ceci peut être extrêmement coûteux tant au niveau du temps de calcul qu'au niveau du stockage des données mais il apparaît qu'il n'est pas nécessaire de connaître complètement la fonction de Green pour pouvoir calculer la matrice de covariance σ.

Tout d'abord, étant donné que les paramètres a et $\mathbf{b}$ du problème (2.3) sont indépendants du temps, il est facile de voir que, en définissant $G(t,0,x,y)\equiv 0$ pour $t<0$, on a la relation suivante pour tout $(s,y)\in[0;T]\times\mathcal{D}$ et pour tout $(t,x)\in[0;T]\times\mathcal{D}$:

$$G(t,s,x,y) = G(t-s,0,x,y)$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Ensuite, on remarque que l'intégrale en espace de la relation (2.12) n'est pas faite sur tout le domaine $\mathcal{D}$ mais uniquement sur Σ. Il n'est donc pas nécessaire de calculer $G(t,s,x,y)$ pour des valeurs du paramètre y hors de Σ. De même, dans la relation (2.12), la variable x de $G(t,0,x,y)$ ne prends ces valeur que dans $\{x^i\}_{i=1\cdots k}$. Il n'est donc pas nécessaire de stocker $G(t,s,x,y)$ pour tous les x. Finalement, il suffit de connaître $G_0(t,x,y) \equiv G(t,0,x,y)$ pour $x \in \{x^i\}_{i=1\cdots k}$, $t \in [0;T]$ et $y \in \Sigma$. De plus, la relation (2.12) peut se réécrire ainsi

$$\sigma(t^i,x^i,t^j,x^j) = \int_\Sigma (G_0(x^i,\cdot,y') \otimes G_0(x^j,\cdot,y')) * \bar{\bar{c}}(\cdot,\cdot)(t^i,t^j)dy' \tag{3.6}$$

3.1.3 Évaluation numérique des convolutions en temps

Les relations (3.2), (3.4) et (3.6) font intervenir le produit de convolution en temps en une dimension pour la première et en deux dimensions pour les deux autres. Dans chacune de ces relations, le produit de convolution est opéré avec la solution d'une équation aux dérivées partielles. En pratique, ces solutions ne sont pas connues explicitement mais sont approchées par une discrétisation en temps et en espace. C'est pourquoi on construit ici une convolution discrète afin d'évaluer ces quantités. Plus précisément, l'objectif est que la convolution discrète 2D soit consistante avec la convolution discrète 1D et le relation rappelée dans la proposition 2.

Convolution 1D

Afin de réaliser un calcul numérique de la convolution 1D de deux fonctions discrètes, il est nécessaire de d'interpoler ces fonctions entre deux points successifs. On choisit ici une interpolation linéaire. Ceci suffit à définir notre convolution discrète 1D, qui sera de cette manière exacte pour les fonctions continues linéaires par morceaux et d'une précision d'ordre deux sinon.

Pour estimer l'erreur numérique globale commise quand la solution du problème (2.6), à ω fixé, est calculée en utilisant relation (3.2) et la convolution discrète 1D au lieu de la simulation directe, on considère une situation 2D très simple avec seulement une seule source. La géométrie de ce cas test est donnée en figure 3.1. L'équation d'évolution est les conditions limites et initiales sont celles du problème (2.6). Les paramètres du cas test sont $a(x) = 1$, $\mathbf{b}(x) = 0$, $\lambda = 0.1$ et le terme source est $Q(t,x) = \mathbb{1}_{[0,1]}(t)\mathbb{1}_B(x)$. Notons $\bar{U}$ la solution du cas test calculée par la simulation directe et U la solution calculée par la relation (3.2). $\bar{U}$ et les $u_{\mathbf{i}}$ (voir relation (3.2)) sont calculés avec une méthode d'éléments finis sur un même maillage régulier et homogène ; et avec un schéma implicite en temps sur une même discrétisation de pas de temps constant Δt. On a calculé $\bar{U}$ et U pour plusieurs pas de temps Δt. La figure 3.2 montre l'évolution de $\|U - \bar{U}\|_{L^2}$ en fonction de Δt ainsi que la droite $y = K\Delta t$. Il en ressort que l'erreur numérique globale se comporte en Δt. Ce résultat est consistant avec l'ordre un en temps du schéma numérique utilisé.

Convolution 2D

Les fonctions discrètes considérées dans les équations (3.4) et (3.6) sont issues d'un produit tensoriel ou d'un calcul de covariance, elles sont donc naturellement discrétisées sur une grille cartésienne. Afin de construire une convolution discrète 2D consistante avec la proposition 2 et la convolution discrète 1D que l'on vient de définir, on choisit d'interpoler, sur chaque rectangle de la grille cartésienne, les fonctions discrètes par des fonctions bilinéaires.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

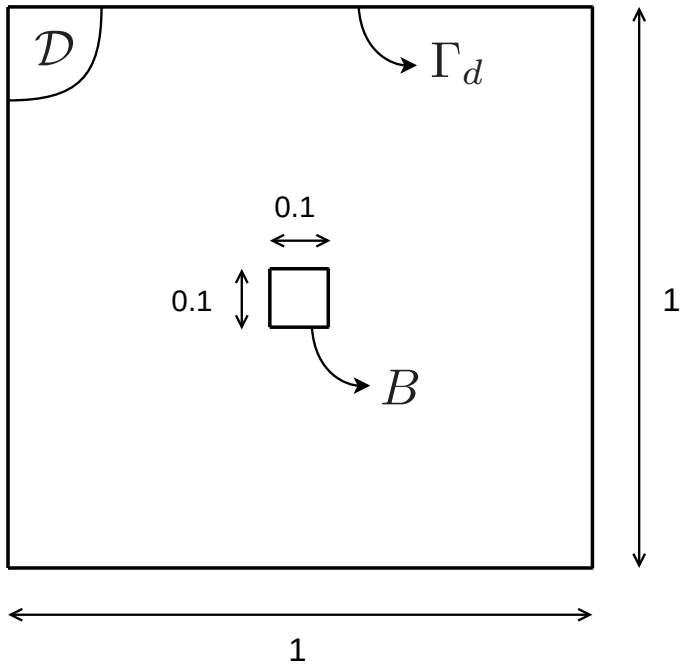


FIGURE 3.1 – Géométrie du cas test pour la convolution

Considérons les sous ensembles $X_d = \{x_i\}_{i=0\cdots N_x^d} \subset \mathbb{R}$ et $Y_d = \{y_i\}_{i=0\cdots N_y^d} \subset \mathbb{R}$ tels que $x_{i-1} < x_i$ et $y_{j-1} < y_i$ pour tout $1 \leq i \leq N_x^d$ et $1 \leq j \leq N_y^d$. Pour $f : X_d \longrightarrow \mathbb{R}$ et $g : X_d \times Y_d \longrightarrow \mathbb{R}$ deux fonctions discrètes respectivement 1D et 2D, on notera leurs interpolées, linéaire pour f et bilinéaire pour g, respectivement sur $[x_0; x_{N_x^d}]$ et $[x_0; x_{N_x^d}] \times [y_0; y_{N_y^d}]$ par $\hat{f}$ et $\hat{g}$. La propositions suivantes précise ce que l'on entend par la consistance des produits de convolution 1D et 2D avec la proposition 2.

Proposition 3. *Considérons les sous ensembles X_d et Y_d comme au dessus, alors pour* $\begin{cases} a, b : & X_d & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ c, d : & Y_d & \longrightarrow & \mathbb{R} \end{cases}$ *et $x_1 \in \mathbb{R}$, $x_2 \in \mathbb{R}$, on a :*

$$(\hat{a} * \hat{b}(x_1))(\hat{c} * \hat{d}(x_2)) = (\widehat{a \otimes c}) * (\widehat{b \otimes d})(x_1, x_2)$$

La conséquence principale de cette proposition pour le travail présenté ici est d'assurer que le calcul numérique de la matrice de covariance σ par la relation (3.6) en utilisant les convolutions discrètes que l'on vient de définir fournit bien une matrice semi-définie positive. La matrice σ étant par construction symétrique, on garantit ainsi qu'elle a bien les propriétés d'une matrice de covariance.

3.1.4 Évalutation d'une distance entre distributions vectorielles

Le théorème 4 établit la convergence en loi des variations normalisées de u^ε autour de u^0. Afin d'illustrer numériquement ce résultat, on cherche une manière de quantifier l'écart entre deux lois de probabilité. Un candidat intéressant pour le cas de variables aléatoires scalaires est la distance de Kolmogorov-Smirnov (voir par exemple [CH74]). On présente ici une généralisation de cette distance au cas de vecteurs aléatoires et l'on discute les conséquences de l'utilisation de cette distance.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

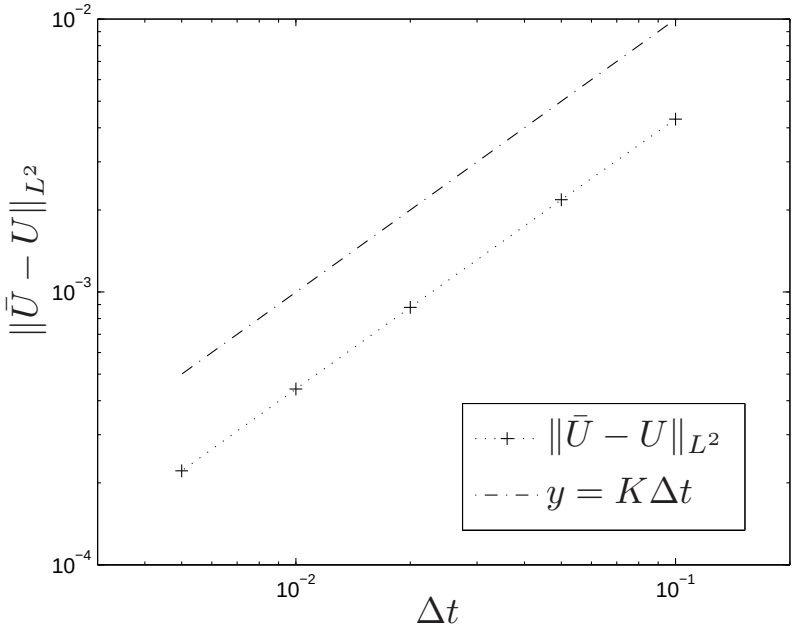


FIGURE 3.2 – Évolution de $\|U - \bar{U}\|_{L^2}$ vs. Δt

Une généralisation de la distance de Kolmogorov-Smirnov

Considérons X et $Y : \Omega \to \mathbb{R}^k$ deux vecteurs aléatoires, on définit les fonctions de répartition de X et Y, F_X et $F_Y : \mathbb{R}^k \to [0;1]$ par

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^k \quad F_X(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(X^{-1}(M(\mathbf{x}))) \quad \text{et} \quad F_Y(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(Y^{-1}(M(\mathbf{x})))$$

où $M(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k : y_i \leq x_i, i = 1 \cdots k\}$. Dans le cas de variables aléatoires scalaires ($k = 1$), cette définition coïncide avec la définition classique. Rappelons la définition de la distance de Kolmogorov-Smirnov (voir [CH74]) :

Définition 1. Soit $X, Y : \Omega \to \mathbb{R}$ deux variables aléatoires, la distance de Kolmogorov-Smirnov entre les distributions de X et Y est définie par :

$$D_{KS}(F_X, F_Y) = \|F_X - F_Y\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$$

En considérant la définition ci dessus de la fonction de répartition, on généralise naturellement la distance de Kolmogorov-Smirnov aux vecteurs aléatoires :

Définition 2. Soit $X, Y : \Omega \to \mathbb{R}^k$ deux vecteurs aléatoires, la distance de Kolmogorov-Smirnov généralisée entre les distributions de X et Y est définie par :

$$D_{gKS}(F_X, F_Y) = \|F_X - F_Y\|_{L^\infty(\mathbb{R}^k)}$$

Dans la suite, cette distance de Kolmogorov-Smirnov généralisée sera utilisée pour comparer une distribution empirique à une distribution théorique (la loi normale centrée réduite multidimensionnelle). Dans ce cas, $F_X(\mathbf{x})$ est connu et $F_Y(\mathbf{x})$ est estimé par la fonction de répartition empirique $\hat{F}_Y$ définie par :

$$\hat{F}_Y(\mathbf{x}) = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \mathbb{1}_{M(\mathbf{x})}(\mathbf{y}^i)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$ et $\{\mathbf{y}^i\}_{i=1..N_s}$ est un échantillon de taille N_s du vecteur aléatoire Y.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

"Bruit statistique"

Considérons N_0 un vecteur aléatoire suivant la loi normale centrée réduite sur $\mathbb{R}^k$ et $Y : \Omega \to \mathbb{R}^k$ un vecteur aléatoire connu de manière empirique par un échantillon de taille N_s. Du fait de ce qu'on appellera le "bruit statistique", la distance $D_{gKS}(\hat{F}_Y, F_{N_0})$ ne peut pas être strictement nulle, et cela même si Y suit la loi normale centrée réduite sur $\mathbb{R}^k$. Prenons maintenant $Y = N_0$, $D_{gKS}(\hat{F}_{N_0}, F_{N_0})$ est une variable aléatoire positive que l'on peut assimiler à un bruit résiduel de l'indicateur D_{gKS} pour les distributions empiriques. Ce bruit résiduel dépend de la dimension du vecteur, k, et de la taille de l'échantillon, N_s. Afin de quantifier cet effet, 100 échantillons de taille $N_s = 2000$ ont été générés pour le cas scalaire ($k = 1$) et pour le cas vectoriel ($k = 2$). Dans les deux cas, la moyenne et l'écart type du bruit résiduel ont été estimés sur les 100 réalisations de $D_{gKS}(\hat{F}_{N_0}, F_{N_0})$ obtenues. Ces résultats sont résumés dans le tableau 3.1. Pour permettre une meilleur lecture des résultats numériques de la section suivante concernant la convergence en loi (figures 3.7 et 3.8), les caractéristiques du bruit résiduel seront inclus dans les figures.

	$k = 1$	$k = 2$
Moyenne	$1.43\ 10^{-2}$	$2.24\ 10^{-2}$
Écart type	$0.82\ 10^{-2}$	$0.79\ 10^{-2}$

TABLE 3.1 – Caractéristiques du bruit résiduel $D_{gKS}(\hat{F}_{N_0}, F_{N_0})$ pour une taille d'échantillon égale à 2000 dans les cas scalaire ($k = 1$) et vectoriel ($k = 2$)

Sensibilité du *rescaling* selon le coefficient de corrélation

L'observation numérique de la convergence prédite par le théorème 4 requiert la comparaison des distributions empiriques de vecteurs aléatoires X_p avec les lois normales centrées et respectivement de matrice de covariance σ_p. Ici p est un paramètre arbitraire.

Notons N_p un vecteur aléatoire suivant la loi normale centrée de matrice de covariance σ_p et N_0 un vecteur aléatoire suivant la loi normale centrée réduite (matrice de covariance égale à l'identité). Plutôt que de calculer les $D_{gKS}(\hat{F}_{X_p}, F_{N_p})$, on préfèrera transformer les X_p de manière à tous pouvoir les comparer à la même loi normale centrée réduite. Pour cela, il suffit de les normaliser ("*rescaling*") par une matrice Γ_p qui vérifie $\Gamma_p \Gamma_p^t = \sigma_p$ (par exemple la matrice de Cholesky). On calcule donc les $D_{gKS}(\hat{F}_{Y_p}, F_{N_0})$ où les Y_p sont donnés par $Y_p = \Gamma_p^{-1} X_p$. Si cette normalisation est triviale dans le cas scalaire ($k = 1$), elle peut être plus délicate dans le cas vectoriel ($k \geq 2$). En particulier, il est facile de voir que le conditionnement de Γ_p diverge quand celui de σ_p diverge, or σ_p n'est pas connu explicitement mais évalué numériquement. Il faut donc s'attendre à voir apparaître des problèmes dus à la précision du calcul de la matrice σ_p quand cette dernière dégénère.

Pour préciser et quantifier ce phénomène, considérons le cas $k = 2$ et étudions la sensibilité du vecteur normalisé $Y_p = \Gamma_p^{-1} X_p$ selon le coefficient de corrélation c_p défini par

$$c_p = \frac{\sigma_p^{1,2}}{\sqrt{\sigma_p^{1,1} \sigma_p^{2,2}}}$$

On s'intéresse au coefficient de corrélation car l'on sait que σ_p dégénère si et seulement si $|c_p|$ tend vers 1. Plus précisément, on veut calculer la sensibilité relative de Y_p à c_p, c'est-à-dire la quantité $\dfrac{\|\partial Y_p / \partial c_p\|}{\|Y_p\|}$. On peut calculer que, au signe près pour les termes

diagonaux :

$$\Gamma_p = \begin{pmatrix} \sqrt{\sigma_p^{1,1}} & 0 \\ c_p\sqrt{\sigma_p^{2,2}} & \sqrt{1-c_p^2}\sqrt{\sigma_p^{2,2}} \end{pmatrix}$$

on obtient alors

$$\Gamma_p^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\sigma_p^{1,1}}} & 0 \\ \frac{-c_p}{\sqrt{1-c_p^2}\sqrt{\sigma_p^{1,1}}} & \frac{1}{\sqrt{1-c_p^2}\sqrt{\sigma_p^{2,2}}} \end{pmatrix}$$

et finalement, on calcule que

$$\frac{\partial Y_p}{\partial c_p} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{1-c_p^2}} & \frac{c_p}{\sqrt{1-c_p^2}} \end{pmatrix} Y_p$$

Étant donné que Y_p est un vecteur aléatoire, qui plus est "proche" d'une loi normale centrée réduite, ses variations n'ont pas de directions privilégiées et donc la quantité $\frac{\|\partial Y_p/\partial c_p\|}{\|Y_p\|}$ est caractérisée par

$$S_{rel}(c_p) \equiv \max_{Y_p} \frac{\|\partial Y_p/\partial c_p\|}{\|Y_p\|} = \frac{|c_p|}{1-c_p^2} \tag{3.7}$$

On constate, comme on s'y attendait, que la sensibilité relative de Y_p par rapport à c_p diverge ($S_{rel} \to \infty$) quand $|c_p| \to 1$. Ainsi, et ceci *même si X_p suit une loi normale centrée de covariance σ_p*, on risque, quand c_p est proche de 1, d'amplifier les erreurs numériques du calcul de σ_p au point que $D_{gKS}(\hat{F}_{Y_p}, F_{N_0})$ soit significativement plus grand que zéros.

3.2 Résultats numériques

3.2.1 Un modèle de sources aléatoires

On présente ici un modèle de source aléatoire décrivant le relâchement de radionucléides pour un colis constitué d'une matrice de verre. Ce modèle, dit "V0Vr", est tiré de [Rib04]. En accord avec le formalisme exposé en section 2.1.2, il s'agit de décrire la fonction temporelle aléatoire $f : \Omega \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$.

Dans ce modèle, on considère que les radionucléides sont contenus de manière homogène dans une matrice de verre. Quand l'eau entre en contact avec la surface de la matrice de verre, un mécanisme chimique provoque l'altération du verre en surface. Les radionucléides contenus dans la part de verre altéré sont alors relâchés et se retrouvent dissouts dans l'eau. Le relâchement des radionucléides peut donc s'écrire $f(t) = q_r(t)Q_{VA}(t)$ où $q_r(t)$ désigne la fraction de radionucléides contenue dans la matrice de verre à l'instant t et où $Q_{VA}(t)$ désigne la vitesse d'altération du verre. Étant donnée la dégradation spontanée des radionucléides, la fraction de radionucléides contenue dans la matrice de verre à l'instant t s'écrit simplement comme $q_r(t) = e^{-\lambda t}q$ avec q la fraction de radionucléides contenue dans la matrice de verre à l'instant initial $t = 0$ et λ la constante de dégradation de l'élément considéré. Le modèle "V0Vr" à proprement parler décrit l'altération du verre, c'est-à-dire le terme $Q_{VA}(t)$. Ce modèle suppose que la vitesse d'altération est constante dans un premier temps, puis, du fait d'un phénomène de saturation en verre altéré au voisinage de

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

la matrice, l'altération se poursuit avec une nouvelle vitesse constante jusqu'à la disparition complète de la matrice de verre. Le seuil de saturation est une donnée déterministe et l'on peut donc considérer de manière équivalente que la première phase consiste en l'altération, à vitesse constante, d'une quantité fixe et déterministe de verre. En notant

- M_1 la quantité de verre relative à la première phase de l'altération,
- M_2 la différence entre la quantité totale de verre et M_1,
- t_0 l'instant où commence le mécanisme d'altération (premier contact de l'eau avec la matrice de verre),
- τ_1 la durée de la première phase,
- τ_2 la durée de la seconde phase (jusqu'à la disparition totale du verre),

le modèle "V0Vr" se résume donc à écrire la vitesse d'altération $Q_{VA}(t)$ comme

$$Q_{VA}(t) = \left| \begin{array}{ccl} M_1/\tau_1 & \text{si} & 0 < t - t_0 \leq \tau_1 \\ M_2/\tau_2 & \text{si} & 0 < t - t_0 - \tau_1 \leq t_0 + \tau_1 + \tau_2 \\ 0 & \text{sinon} & \end{array} \right.$$

On dispose ainsi d'un modèle de relâchement déterministe. En suivant les considérations sur l'incertitude des paramètres du modèle faites dans [Rib04], on considérera que τ_1 et τ_2 sont deux variables aléatoires indépendantes telles que $\log(\tau_1)$ et $\log(\tau_2)$ suivent une loi normale respectivement de paramètres (moyenne et écart type) $(m_{L\tau_1}, \sigma_{L\tau_1})$ et $(m_{L\tau_2}, \sigma_{L\tau_2})$. Finalement, quitte à assimiler M_1 et M_2 aux produits qM_1 et qM_2, on définit le modèle de relâchement aléatoire f_{C1} suivant :

$$f_{C1}(\omega, t) = \left| \begin{array}{ccl} e^{-\lambda t} M_1/\tau_1(\omega) & \text{si} & 0 < t - t_0 \leq \tau_1(\omega) \\ e^{-\lambda t} M_2/\tau_2(\omega) & \text{si} & 0 < t - t_0 - \tau_1(\omega) \leq t_0 + \tau_1(\omega) + \tau_2(\omega) \\ 0 & \text{sinon} & \end{array} \right. \tag{3.8}$$

dont les valeurs numériques des paramètres sont précisées dans le tableau 3.2.

Paramètre	Valeur	
M_1	$2\ 10^{-3}$	$mol.m^{-2}$
M_2	3.998	$mol.m^{-2}$
t_0	$4\ 10^{3}$	ans
$m_{L\tau_1}$	2.112	$\log(ans)$
$\sigma_{L\tau_1}$	0.7196	$\log(ans)$
$m_{L\tau_2}$	13.80	$\log(ans)$
$\sigma_{L\tau_2}$	0.7806	$\log(ans)$

TABLE 3.2 – Valeurs numérique des paramètres de f_{C1}

3.2.2 Définition des cas test

On définit ici deux cas test qui partagent la même géométrie et les mêmes coefficients pour l'équation d'évolution mais qui diffèrent par leurs termes sources aléatoires. Bien que la géométrie et les paramètres physiques considérés décrivent une situation synthétique mais non réaliste d'un site de stockage, ces cas test peuvent être utiles pour mieux comprendre ce qui ce passe dans un site de stockage de déchets réel.

Géométrie et coefficients de l'équation

Pour simplifier, on travaillera avec une géométrie bi-dimensionnelle ($d = 2$). Le domaine $\mathcal{D}$ est pris rectangulaire : $\mathcal{D} = [-750\,m; 2250\,m] \times [-400\,m; 400\,m]$; la frontière Γ_d est prise

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

comme le haut du domaine : $\Gamma_d = [-750\,m; 2250\,m] \times \{400\,m\}$; et la taille de la zone de stockage L est fixée à $L = 1500\,m$ (voir la figure 3.3). La taille des sources dans la variable locale (voir (2.1)) est donnée par $s_1 = 7\ 10^{-1}$, $s_2 = 5\ 10^{-2}$ et $\gamma = 1$.

Dans les deux cas test, on prendra

- un tenseur de diffusion hydrodynamique isotrope et constant en espace : $a(x) = 10^{-1}\ m^2/ans$ pour tout $x \in \mathcal{D}$;
- une vitesse de Darcy nulle : $\mathbf{b}(x) = 0\,m/ans$ pour tout $x \in \mathcal{D}$;
- une constante de dégradation $\lambda = 4.415\ 10^{-8}\ ans^{-1}$ correspondant à l'élément radioactive ^{129}I.

Le temps final est fixé à $T = 10^6\ ans$.

Des points d'observation

L'observation numérique de la convergence prédite par la théorème 4 requiert la définition de sous ensembles de $[0;T] \times (\mathcal{D} \setminus \Sigma)$. Ces sous ensembles sont des collections de points "temps-espace" où le champ aléatoire est observé simultanément. Puisque le processus d'homogénéisation est essentiellement pertinent pour l'approximation du champ lointain, on considérera deux points du domaine $\mathcal{D}$ situés "loin" des sources. Le premier point, $x_A = (750m, 200m)$, est pris "loin" des bords du domaine tandis que le second point, $x_B = (750\,m, 350\,m)$, est pris "proche" du haut du domaine où l'on a fixé la condition de Dirichlet (voir figure 3.3). On définit de plus deux temps $t_1 = 10^5\,ans$ et $t_2 = 10^6\,ans$. Ces temps ont été choisis de manière à ce que les concentrations respectivement en x_A et x_B soient non négligeables.

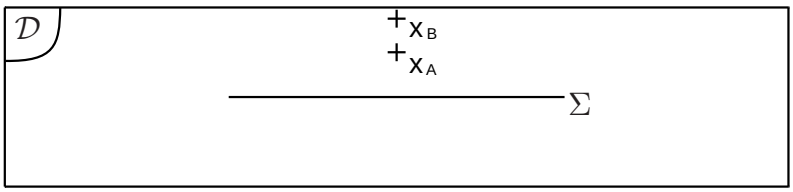


FIGURE 3.3 – Domaine des cas test et points d'observation

A partir de ces deux points d'espace, x_A et x_B, et de ces deux temps, t_1 et t_2, on constitue des ensembles de points ("temps-espace") d'observation. Pour simplifier, on ne considérera que les ensembles de taille $k = 1$ (cas scalaire) et $k = 2$ (cas vectoriel) recensé dans le tableau 3.3.

cas scalaire	cas vectoriel
$\{(t_1, x_A)\}$	$\{(t_1, x_A), (t_1, x_B)\}$
$\{(t_1, x_B)\}$	$\{(t_2, x_A), (t_2, x_B)\}$
$\{(t_2, x_A)\}$	$\{(t_1, x_A), (t_2, x_A)\}$
$\{(t_2, x_B)\}$	$\{(t_1, x_B), (t_2, x_B)\}$

TABLE 3.3 – Les différent ensembles de points d'observation "temps-espace" considérés pour le calcul de $D_{gKS}(\hat{F}_Y, F_{N_0})$

Deux cas test

Pour finir de poser nos deux cas test, il ne reste plus qu'à définir le second membre aléatoire pour chacun d'eux. Notre objectif est de définir deux seconds membres compa-

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

rables. Pour les deux cas test on supposera les sources indépendantes les unes des autres, ce qui correspond à l'hypothèse **H7**. Pour le premier cas test, on prendra le modèle de sources aléatoires présenté en section 3.2.1.Pour le second cas test, on supposera que les sources aléatoires respectent l'hypothèse **H6**. Plus précisément, on fixe le terme f de l'équation (2.4) ainsi :

- **cas test 1** : $f(\omega, t) \equiv f_{C1}(\omega, t)$
- **cas test 2** : $f(\omega, t) \equiv \alpha(\omega)\mathbf{E}[f_{C1}(\cdot, t)]$ où $\alpha(\omega)$ est une variable aléatoire uniforme (*i.e.* équiprobable sur un interval) dont la moyenne vaut 1 et l'écart type vaut 0.6653

La moyenne et l'écart type de $\alpha(\omega)$ sont choisis de manière à ce que, dans les deux cas test, la moyenne de $f(\omega, t)$ soit la même (voir figure 3.4) et que l'écart type de $f(\omega, t)$ soit "proche", en particulier pour les temps "court" ($t < 10^5\, ans$) (voir figure 3.5).

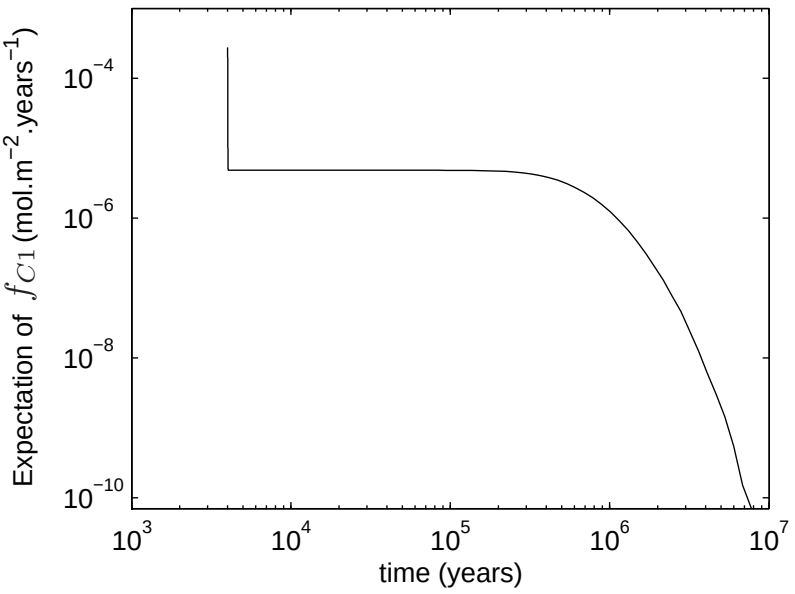


FIGURE 3.4 – Évolution en temps de $\mathbf{E}[f(\cdot, t)]$ pour les cas test 1 et 2

3.2.3 Implémentation

La résolution des problèmes de convection-diffusion a été effectuée par le logiciel *Cast3m* (voir [CEA]) en utilisant une discrétisation en temps implicite et une méthode d'éléments finis mixtes hybride (EFMH) en espace. Un des intérêts de la méthode EFMH dans notre cas est qu'elle travaille directement sur les flux portés par les faces du maillage. Ceci nous permet de traiter simplement la condition de saut sur le flux, telle que décrite dans le problème (2.13) (voir la section 2.2.3), qui définit la limite déterministe, u^0, de u^ε.

Une attention particulière a été portée à la conception des maillages. Il est en effet essentiel de bien dissocier les effets de convergence dus à l'homogénéisation d'une part, de ceux dus à la méthode de discrétisation spatiale d'autre part. Pour gérer ce point, notre approche a été de choisir des maillages suffisamment raffinés pour que l'erreur de la méthode de discrétisation soit négligeable devant l'erreur provenant de l'homogénéisation.

Les calculs de post-traitement (convolution 1D et 2D, calcul de D_{gKS}) ont été implémentés dans le logiciel Matlab$^{\text{TM}}$.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

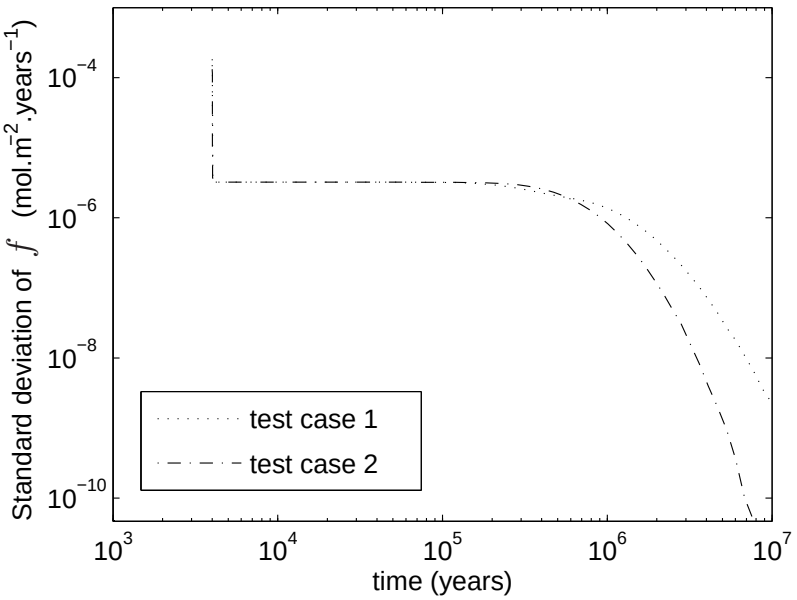


FIGURE 3.5 – Évolution en temps de $\sqrt{\mathrm{Var}[f(\cdot,t)]}$ pour les cas test 1 et 2

3.2.4 Résultats

Convergence vers une limite déterministe

Les figures 3.6(a) et 3.6(b) représentent l'évolution de $\mathbf{E}\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}$ en fonction de ε (ligne continue), respectivement pour le cas test 1 et 2. Le comportement de la borne supérieure donnée dans le théorème 2 est tracé en pointillé sur ces deux figures. On observe bien une convergence de la moyenne de l'erreur vers zéro quand ε tend vers zéro en accord avec l'ordre de convergence estimé dans le théorème 2. Plus précisément, sur ces deux cas test, la convergence est plus rapide que l'estimation en ε^2 du théorème 2 (ici γ vaut 1) puisque l'ordre de convergence observé est proche de 3.

Convergence en loi

On cherche ici à illustrer numériquement la convergence en loi prédite par les théorèmes 3 et 4. Pour cela on considérera les vecteurs aléatoires

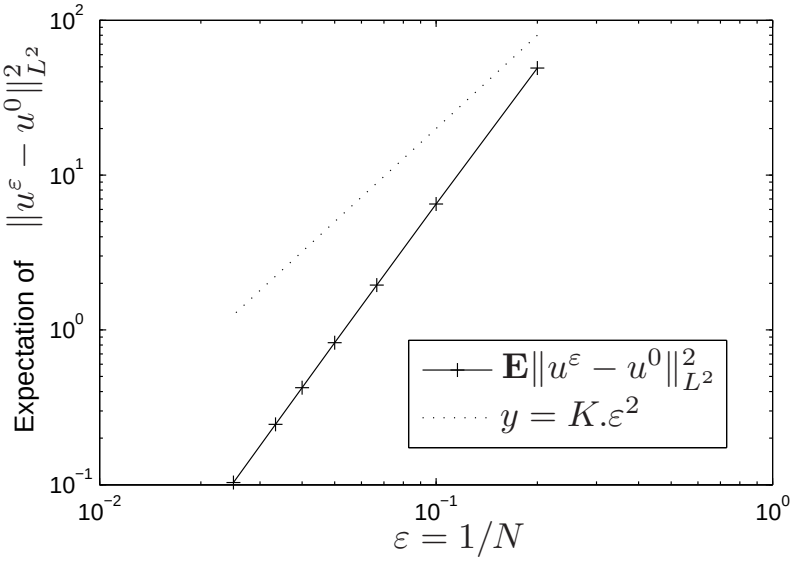
$$X = (\varepsilon^{-(d-1)/2}(u^\varepsilon(t_j,x_j) - u^0(t_j,x_j)))_{j=1,\cdots,k}$$

avec les ensembles de points d'observation $\{(t_j,x_j)\}_{j=1,\cdots,k}$ décrits dans le tableau 3.3. On distinguera deux situations :

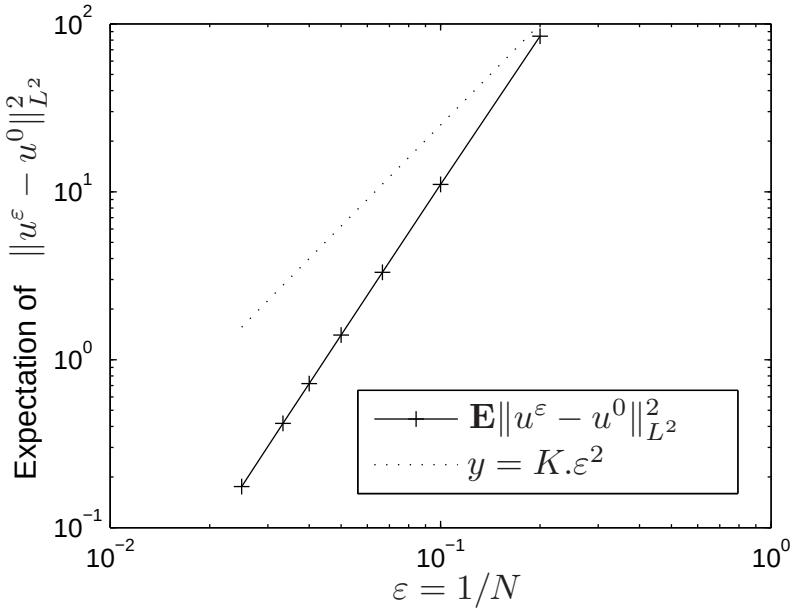
– **cas scalaire** : situation où $k=1$, correspondant à la configuration du théorème 3 ;
– **cas vectoriel** : situation où $k=2$, correspondant à la configuration du théorème 4.

Afin d'observer de manière synthétique, sur chaque cas test, l'adéquation des vecteurs aléatoires X avec leurs lois limites (chacune de covariance σ dépendant de l'ensemble de points d'observation considéré), on ne comparera pas X à sa loi limite, mais les vecteurs normalisés $Y = \Gamma(\sigma)^{-1}X$ avec $\Gamma(\sigma)\Gamma(\sigma)^t = \sigma$. Comme expliqué en section 3.1.4 (dernière partie), la loi limite pour tout les Y est alors la loi normale centrée réduite à valeur dans $\mathbb{R}^k$. Notons, en respectant la notation de la section 3.1.4, F_{N_0}, la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite à valeur dans $\mathbb{R}^k$. On va donc évaluer l'adéquation des vecteurs aléatoires $Y = \Gamma(\sigma)^{-1}X$ avec la loi normale centrée réduite en dimension 1 pour

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010



(a) Cas test 1



(b) Cas test 2

FIGURE 3.6 – Évolution de $\mathbf{E}\|u^\varepsilon - u^0\|^2_{L^2(0,T;L^2(\mathcal{D}))}$ vs. ε pour les deux cas test

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

le cas scalaire et en dimension 2 pour le cas vectoriel. Pour évaluer cette adéquation, on utilise la distance de Kolmogorov-Smirnov généralisée, définie en section 3.1.4, entre les distributions empiriques des Y et la loi normale centrée réduite. C'est-à-dire qu'on observe l'évolution de $D_{gKS}(\hat{F}_Y, F_{N_0})$ en fonction de ε pour chaque ensemble de points d'observation et pour chaque cas test (voir figures 3.7 et 3.8). Les fonctions de répartition empirique $\hat{F}_Y$ sont estimées sur des échantillons de u^ε de taille 2000. Ces échantillons sont calculés à l'aide de l'équation (3.2) et de la convolution discrète 1D définie en section 3.1.3.

Cas scalaire Les résultats pour le cas scalaire ($k = 1$) sont tracés en figure 3.7(a) pour le cas test 1 et en figure 3.7(b) pour le cas test 2. Les caractéristiques du bruit résiduel (voir section 3.1.4 partie *"Bruit statistique"*) données dans le tableau 3.1 sont représentées en lignes pointillées sur ces deux figures. On observe que la valeur de $D_{gKS}(\hat{F}_Y, F_{N_0})$ décroit avec ε jusqu'à être de l'ordre du bruit résiduel, ce qui confirme la convergence en loi prédite par le théorème 3.

Cas vectoriel Les résultats pour le cas vectoriel ($k = 2$) sont tracés en figure 3.8(a) pour le cas test 1 et en figure 3.8(b) pour le cas test 2. Comme précédemment pour les résultats du cas scalaire, les caractéristiques du bruit résiduel sont représentées en lignes pointillées sur ces deux figures. On observe que la valeur de $D_{gKS}(\hat{F}_Y, F_{N_0})$ décroit avec ε jusqu'à être de l'ordre du bruit résiduel, à l'exception des ensembles de points d'observation :

- $\{(t_1, x_A), (t_1, x_B)\}$ dans le cas test 1 ;
- $\{(t_1, x_A), (t_1, x_B)\}$ et $\{(t_2, x_A), (t_2, x_B)\}$ dans le cas test 2.

Pour comprendre ces exceptions, on a calculé la valeur des coefficients de corrélation c pour chaque ensemble de points d'observation et pour chaque cas test ainsi que les valeurs de $S_{rel}(c)$ associées (voir section 3.1.4 dernière partie). Ces valeurs sont résumées dans le tableau 3.4. On constate que pour les trois exceptions observées, la normalisation $Y = \Gamma(\sigma)^{-1}X$ est particulièrement sensible à la précision numérique du calcul de σ. Autrement dit, ces trois exceptions n'invalident pas la convergence prédite par le théorème 4 mais suggèrent plutôt que, pour constater l'adéquation des vecteurs X correspondant avec les lois normales centrées de covariance Σ, il faudrait ou bien améliorer la précision numérique du calcul des σ, ou bien utiliser un autre indicateur. Un indicateur possible serait bien sûr $D_{gKS}(\hat{F}_X, F_{\Gamma(\sigma)N_0})$, à comparer avec le bruit résiduel $D_{gKS}(\hat{F}_{\Gamma(\sigma)N_0}, F_{\Gamma(\sigma)N_0})$.

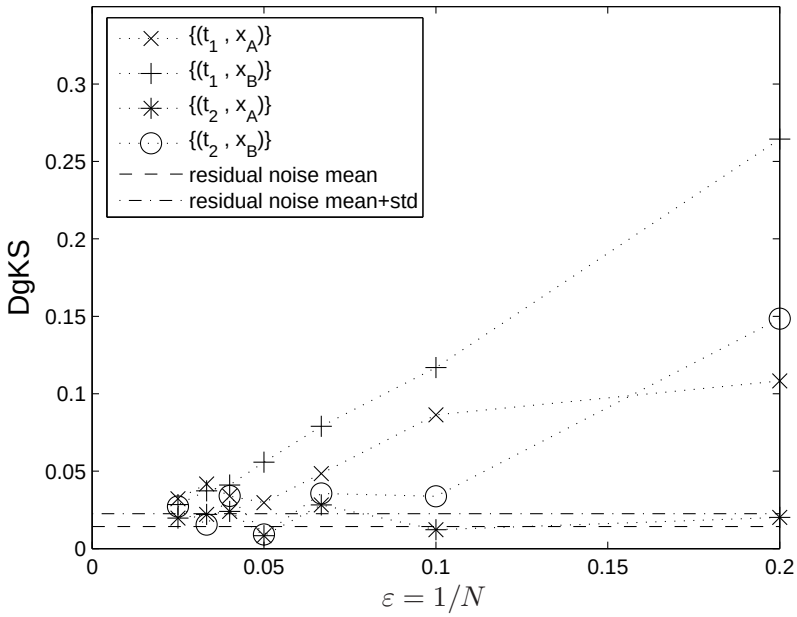
	Cas test 1		Cas test 2	
	c	$S_{rel}(c)$	c	$S_{rel}(c)$
$\{(t_1, x_A), (t_1, x_B)\}$	99.50 %	99.79	99.50 %	99.79
$\{(t_2, x_A), (t_2, x_B)\}$	96.69 %	14.86	99.92 %	645.12
$\{(t_1, x_A), (t_2, x_A)\}$	−0.79 %	79.02 10^{-4}	85.54 %	3.19
$\{(t_1, x_B), (t_2, x_B)\}$	16.96 %	17.46 10^{-2}	87.31 %	3.67

TABLE 3.4 – Valeurs dans les deux cas test des coefficients de corrélation c et des sensibilités relatives $S_{rel}(c)$ pour les différents ensembles de points d'observation

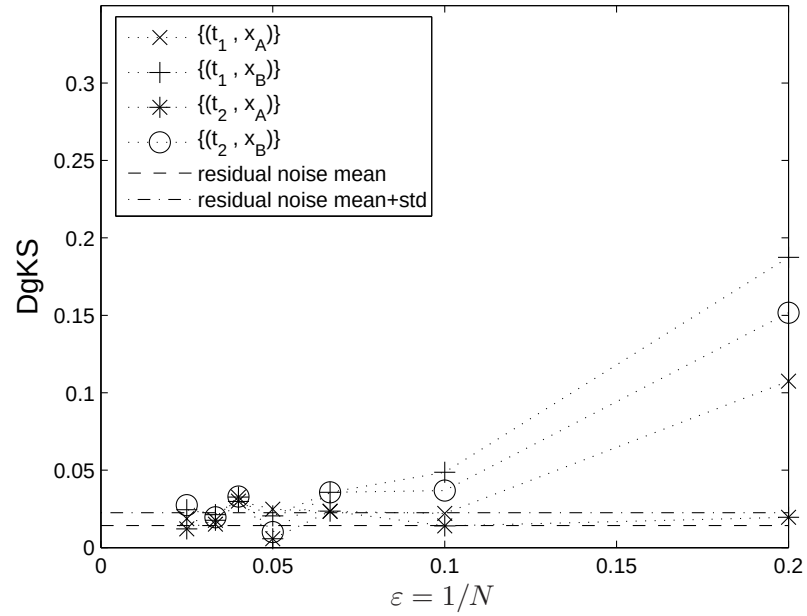
Conclusions

Sur des cas test synthétiques et représentatifs d'un site de stockage géologique de déchets radioactifs, on démontre ainsi la faisabilité d'une approche alternative, issue de la mise en application des résultats théoriques de [BP08], pour évaluer l'incertitude de la concentration de radionucléides en champ lointain en fonction de l'incertitude modélisée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010



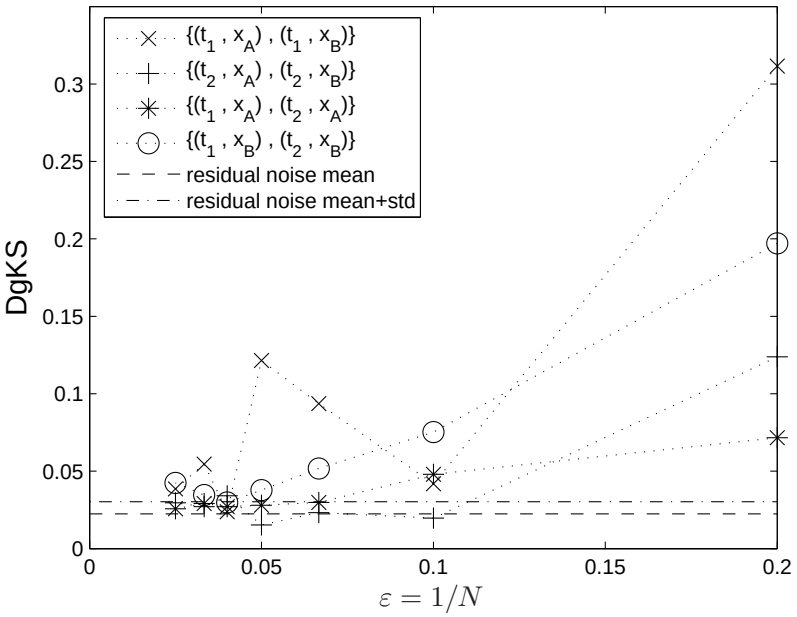
(a) Cas test 1



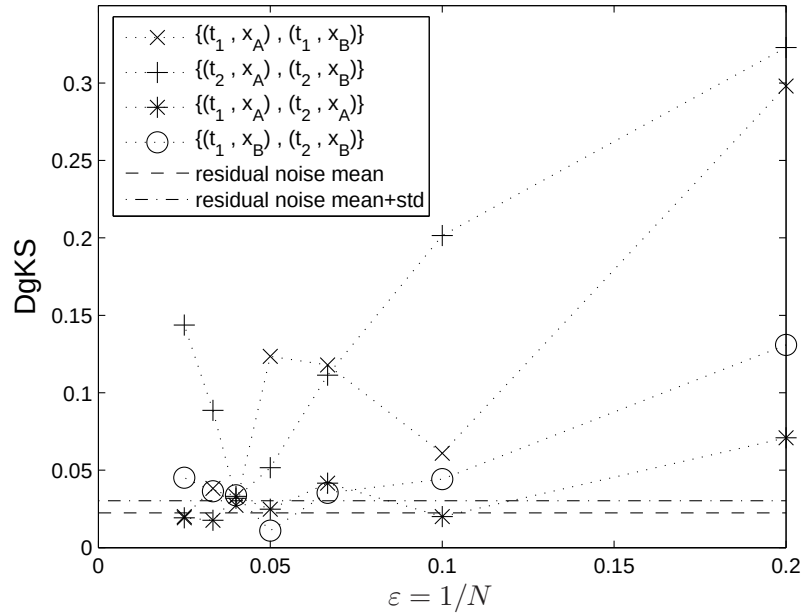
(b) Cas test 2

FIGURE 3.7 – Évolution de D_{gKS} vs. ε pour les deux cas test : cas scalaire

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010



(a) Cas test 1



(b) Cas test 2

FIGURE 3.8 – Évolution de D_{gKS} vs. ε pour les deux cas test : cas vectoriel

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

sur le relâchement des colis. Il est à noter que, si l'utilisation de maillages suffisamment raffinés a été nécessaire pour l'observation des résultats de convergence prévus par la théorie, cette contrainte sur les maillages peut être relâché lorsque l'on cherche seulement à évaluer le champ de concentration aléatoire. Typiquement, on utilisera dans la zone de stockage des mailles de la taille, voire plus grande, que la taille d'un colis là où un calcul sur le problème aléatoire détaillé requerrait plusieurs mailles pour un seul colis. Cette approche permet donc de mener une analyse en champ lointain de la fiabilité d'un site de stockage avec des données incertaines pour un coût en mémoire et en temps de calcul maitrisé.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Deuxième partie

Écoulement liquide/gaz en milieux poreux

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 4

Contexte

La seconde partie de ce mémoire, qui regroupe les chapitres 4 à 9, traite des écoulements multiphasiques en milieux poreux et plus particulièrement du cas du mélange eau/hydrogène en application au stockage des déchets radioactifs en milieu géologique. On y élabore un modèle mathématique décrivant ces écoulements (chapitres 4 et 5). L'existence de solutions à ce modèle est étudiée (chapitre 6) et une méthode de résolution est construite (chapitre 7). Ce travail donne lieu à la simulation d'une configuration complexe représentative d'un site de stockage (chapitre 8). Enfin l'homogénéisation du modèle réalisée et mise en application sur la configuration précédente (chapitre 9).

Après une introduction à certains problèmes spécifiques du stockage géologique des déchets radioactifs qui poussent à se poser la question des écoulements multiphasiques dans un site de stockage, ce chapitre présente les différents phénomènes physiques mis en cause et leur modélisation respective. L'accent est porté sur la mise en évidence des hypothèses physiques constitutives de cette modélisation. Enfin, une analyse des conditions d'existence de la phase gazeuse est menée à la fin de ce chapitre.

4.1 Problématique

La partie précédente de ce mémoire, portant sur la migration des radionucléides, considérait que le milieu poreux (les roches) était totalement saturé en eau. Si cette hypothèse est réaliste pour les milieux géologiques naturels, la construction et la vie d'un site de stockage dans ce milieu est susceptible de la remettre en cause.

En premier lieu, le creusement du site et de ses multiples galeries ainsi que la phase d'exploitation qui précède la fermeture du site constituent un apport direct de gaz (l'air ambiant) mais aussi indirect via des matériaux tels que les bétons qui ne sont, eux, pas saturés en eau. On s'attend donc à ce que le stockage et son voisinage proche ne soient pas totalement saturés en eau après sa fermeture. Une phase de resaturation en eau du stockage, susceptible d'influer sur les écoulements environnants, est alors à prévoir.

Un second aspect, plus problématique, est la production, par le stockage lui-même, d'hydrogène issu de la dégradation chimique de certains matériaux du stockage. Ce phénomène est capable de générer une grande quantité d'hydrogène et peut s'étaler sur une grande période de temps. Il en résulte que, à l'inverse du phénomène précédent de resaturation du site en post-fermeture, une accumulation du gaz dans le stockage est envisageable. Ceci, en plus de son influence sur les écoulements autour et dans le stockage, fait craindre une montée en pression à l'intérieur du stockage dont on ne peut exclure *a priori* qu'elle ait des conséquences sur la fonction de confinement des déchets du site.

Ce dernier point vient donner tout son intérêt à la bonne compréhension des écoulements liquide/gaz en milieux poreux pour un site de stockage, en particulier pour permettre à simulation numérique de prévoir correctement comment l'hydrogène migre du stockage jusque dans le milieu extérieur.

4.2 Physique du problème

On décrit dans cette section les différents phénomènes intervenant dans le transport dans un milieu poreux saturé par un "fluide" composé de deux phases comprenant deux composants. Dans la situation qui nous intéresse, la migration de l'hydrogène au sein d'un site de stockage géologique, les deux phases considérées sont la phase liquide et la phase gazeuse ; les deux composants considérés sont l'eau (constituant l'essentiel de la phase liquide) et l'hydrogène (constituant l'essentiel de la phase gazeuse). Pour chaque composant, deux types de transports sont possibles au sein d'une phase : la convection due à l'écoulement de la phase et la diffusion due aux différences de concentration du composant dans la phase. De plus l'interaction des deux phases fait intervenir deux phénomènes supplémentaires : d'une part un phénomène capillaire, au niveau des pores, qui impose une différence entre les pressions de chaque phase, et d'autre part un phénomène thermodynamique qui relie les compositions de chaque phase.

Trois hypothèses essentielles sont faites dans la modélisation physique qui suit : le milieu poreux est supposé indéformable ; la température du fluide est supposée constante ; le fluide est supposé être à l'équilibre thermodynamique à chaque instant.

Bien que le modèle physique présenté ici ne soit pas spécifique à la situation eau/hydrogène, on utilisera dans la suite la convention de notation suivante : les quantités relatives aux phases seront munies de l'indice l (pour la phase liquide) ou g (pour la phase gazeuse) et les quantités relatives aux composants seront munies de l'exposant w (pour le composant eau) ou h (pour le composant hydrogène).

4.2.1 "Fluide" à deux phases et deux composants en milieux poreux

Le mélange fluide est supposé composé de deux phases : liquide et gaz. Pour chaque phase $\alpha \in \{l, g\}$, on note p_α sa pression ($ML^{-1}T^{-2}$) et ρ_α sa densité massique (ML^{-3}). De la même manière qu'en section 1.2.2, on définit la porosité cinématique comme le rapport entre le volume poreux où le fluide est libre de circuler et le volume total de milieu poreux. Par abus de langage, on parlera plus simplement de la porosité ($s.d.$) [1] du milieu poreux. On note cette quantité Φ et l'on suppose qu'elle ne dépend que de l'espace (milieu poreux indéformable). On définit enfin la saturation ($s.d.$) de la phase $\alpha \in \{l, g\}$ comme le rapport entre le volume de la phase α libre de circuler et le volume poreux où le fluide est libre de circuler. Puisque le volume poreux est entièrement occupé par le fluide (le mélange fluide sature le milieu poreux), on a la relation suivante :

$$S_l + S_g = 1 \tag{4.1}$$

Chaque phase est elle même constituée de deux composants : eau et hydrogène. La composition de chaque phase $\alpha \in \{l, g\}$ peut être caractérisée par les concentrations massiques des composants eau et hydrogène au sein de cette phase. On notera ρ_α^i la concentration massique (ML^{-3}) du composant i, $i \in \{w, g\}$, dans la phase α, $\alpha \in \{l, g\}$.

1. $s.d.$: sans dimensions

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

La densité massique de chaque phase correspond à la somme des concentrations massiques de tous les composants qu'elle contient, on a donc :

$$\rho_l = \rho_l^w + \rho_l^h \quad \text{et} \quad \rho_g = \rho_g^w + \rho_g^h \tag{4.2}$$

4.2.2 Conservation de la masse

La conservation de la masse s'applique à chaque composant i et peut s'écrire, pour un volume de contrôle arbitraire $\mathfrak{R}$:

$$\frac{dm^i}{dt} + F^i = \int_{\mathfrak{R}} \mathcal{F}^i d\mathbf{x} \ , \ i \in \{w, h\} \tag{4.3}$$

où m^i est la masse (M) du composant i dans le volume de contrôle $\mathfrak{R}$ à l'instant t, F^i est le débit (MT^{-1}) de composant i sortant à travers la frontière du volume de contrôle $\partial\mathfrak{R}$ et $\mathcal{F}^i$ est la source volumique ($ML^{-3}T^{-1}$) en composant i.

Le composant i est présent dans chacune des phases, la masse totale du composant i contenue dans le volume $\mathfrak{R}$ est donc une somme de la masse contenue dans chaque phase :

$$m^i = \int_{\mathfrak{R}} \Phi(S_l \rho_l^i + S_g \rho_g^i) d\mathbf{x} \ , \ i \in \{w, h\}$$

Dans chaque phase, la migration du composant i est due pour une part au transport par l'écoulement de la phase et pour une autre part à la diffusion moléculaire au sein de la phase. On a donc

$$F^i = \int_{\partial\mathfrak{R}} (\rho_l^i \mathbf{q}_l + \rho_g^i \mathbf{q}_g + \mathbf{j}_l^i + \mathbf{j}_g^i) \cdot \mathbf{n} d\mathbf{x} \ , \ i \in \{w, h\}$$

où $\mathbf{n}$ est la normale unitaire sortante de $\partial\mathfrak{R}$, $\mathbf{q}_l$ et $\mathbf{q}_g$ sont les vitesses d'écoulement (LT^{-1}) des phases liquide et gazeuse et $\mathbf{j}_\alpha^i$ est le flux diffusif effectif ($ML^{-2}T^{-1}$) du composant $i \in \{w, h\}$ dans la phase $\alpha \in \{l, g\}$. Les quantités $\mathbf{q}_\alpha$ et $\mathbf{j}_\alpha^i$ seront décrites plus en détails dans les paragraphes suivants. La relation (4.3) nous donne finalement les équations aux dérivées partielles suivantes, qui traduisent la conservation de la masse pour l'eau et l'hydrogène :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi S_l \rho_l^w + \Phi S_g \rho_g^w\right) + \operatorname{div}\left(\rho_l^w \mathbf{q}_l + \rho_g^w \mathbf{q}_g + \mathbf{j}_l^w + \mathbf{j}_g^w\right) = \mathcal{F}^w \tag{4.4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi S_l \rho_l^h + \Phi S_g \rho_g^h\right) + \operatorname{div}\left(\rho_l^h \mathbf{q}_l + \rho_g^h \mathbf{q}_g + \mathbf{j}_l^h + \mathbf{j}_g^h\right) = \mathcal{F}^h \tag{4.5}$$

4.2.3 Loi de Darcy généralisée

Comme on l'a vu en section 1.2.2, l'écoulement monophasique dans un milieu poreux saturé est décrit par la loi de Darcy. Pour un fluide de densité massique ρ, de viscosité dynamique μ ($ML^{-1}T^{-1}$) et de pression p la loi de Darcy exprime $\mathbf{q}$, la vitesse d'écoulement (LT^{-1}) du fluide saturant, par

$$\mathbf{q} = -\frac{1}{\mu}\mathbb{K}(\mathbf{x})(\nabla p - \rho \mathbf{g})$$

où $\mathbf{g}$ est l'accélération de la pesanteur (LT^{-2}) et $\mathbb{K}(\mathbf{x})$ le tenseur de perméabilité intrinsèque absolue (L^2) du milieu poreux au point $\mathbf{x}$. La loi de Darcy-Muskat généralise

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

cette relation aux écoulements multiphasiques en introduisant une notion de fonction de perméabilité relative qui s'écrit

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{k_{r,\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha}\mathbb{K}(\mathbf{x})(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}) \ , \ \alpha \in \{l, g\} \tag{4.6}$$

Ici $k_{r,\alpha}(S_\alpha)$ est la fonction de perméabilité relative (*s.d.*) de la phase α, c'est une fonction à valeur dans $[0; 1]$, croissante et qui satisfait les deux égalités suivantes :

$$k_{r,\alpha}(S_\alpha = 0) = 0 \quad \text{et} \quad k_{r,\alpha}(S_\alpha = 1) = 1$$

En d'autres termes, la loi de Darcy-Muskat est similaire à la loi de Darcy à la différence que la perméabilité absolue $\mathbb{K}$ est remplacée par une perméabilité "effective" $k_{r,\alpha}\mathbb{K}$.

Le concept de perméabilité relative peut s'expliquer par le fait que chaque phase a tendance à développer son propre réseau d'écoulement au niveau des pores. On parle de "ségrégation" de l'écoulement des phases, celles-ci ne s'écoulant pas dans les mêmes pores simultanément. De manière générale, il y a interférence entre les réseaux d'écoulements des deux phases, le mélange fluide s'écoule donc plus difficilement qu'un fluide monophasique. Ceci ce traduit par le fait que la somme des perméabilités relatives des deux phases est inférieure à 1. Rappelons cependant que l'on a vu en section 1.2.2 que la loi de Darcy ne respectait pas les principes physiques fondamentaux qui s'écrivent à l'échelle des pores, il en va de même pour sa généralisation par la loi de Darcy-Muskat qui peut-être discutée selon son application.

4.2.4 Diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire d'un composant dans une phase libre (hors du milieu poreux) est décrite par la loi de Fick qui stipule que le flux diffusif molaire ($NL^{-2}T^{-1}$) $\mathbf{J}^i_\alpha$ du composant i dans la phase α est proportionnel à la concentration molaire c_α de la phase α et au gradient de la fraction molaire X^i_α du composant i dans la phase α. Notons M^i la masse molaire (MN^{-1}) du composant i, on peut définir c^i_α la concentration molaire (NL^{-3}) du composant i dans la phase α par

$$c^i_\alpha = \frac{\rho^i_\alpha}{M^i} \ , \ i \in \{w, h\} \ , \ \alpha \in \{l, g\}$$

La concentration molaire de la phase α est alors la somme des concentrations molaires des composants présents dans la phase ; dans le cas eau/hydrogène, on a donc

$$c_\alpha = c^w_\alpha + c^h_\alpha = \frac{\rho^w_\alpha}{M^w} + \frac{\rho^h_\alpha}{M^h} \ , \ \alpha \in \{l, g\} \tag{4.7}$$

Et la fraction molaire (*s.d.*) du composant i dans la phase α est le rapport de la concentration molaire du composant sur la concentration molaire de la phase :

$$X^i_\alpha = \frac{c^i_\alpha}{c_\alpha} \ , \ i \in \{w, h\} \ , \ \alpha \in \{l, g\} \ ; \ \sum_{i \in \{w,h\}} X^i_\alpha = 1 \ , \ \alpha \in \{l, g\} \tag{4.8}$$

Finalement, la diffusion moléculaire du composant i dans la phase libre α s'écrit

$$\mathbf{J}^i_\alpha = -c_\alpha D^i_\alpha \nabla X^i_\alpha \ , \ i \in \{w, h\} \ , \ \alpha \in \{l, g\}$$

où D^i_α est le coefficient de diffusion (L^2T^{-1}) du composant i dans la phase α libre.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Si l'on considère désormais que le fluide n'est plus libre mais réparti dans les pores d'un milieu poreux, le flux diffusif effectif (voir équations (4.4) et (4.5)) intègre le fait que, pour un volume de contrôle $\mathfrak{R}$, le volume effectivement occupé par la phase α est $\Phi S_\alpha \mathfrak{R}$. Le flux de diffusion moléculaire effectif est alors $\Phi S_\alpha \mathbf{J}^i_\alpha$. On définit donc $\mathbf{j}^i_\alpha$, le flux diffusif *massique* effectif ($ML^{-2}T^{-1}$) du composant i dans la phase α (voir équations (4.4) et (4.5)), par

$$\mathbf{j}^i_\alpha = -M^i \Phi S_\alpha c_\alpha \bar{D}^i_\alpha \nabla X^i_\alpha \ , \ i \in \{w, h\} \ , \ \alpha \in \{l, g\} \tag{4.9}$$

où $\bar{D}^i_\alpha$ est le coefficient de diffusion moléculaire effectif (L^2T^{-1}) du composant i dans la phase α. Ici $\bar{D}^i_\alpha$ remplace le coefficient de diffusion moléculaire en phase *libre* D^i_α. Ce coefficient est moindre ($\bar{D}^i_\alpha \leq D^i_\alpha$), il traduit le fait que l'interaction du fluide avec la matrice rocheuse peut "gêner" le processus de diffusion pure. De nombreux modèles empiriques (voir par exemple [MQ61], [Cur60], [LTE76], [RM85], [MS71] et [CR87]), basés sur l'expérience ou sur des considérations plus physiques, décrivent le rapport $\bar{D}^i_\alpha / D^i_\alpha$ (souvent noté τ et nommé *tortuosité*) comme une fonction scalaire de la saturation de la phase dans le milieu poreux. Cette notion de tortuosité reste toutefois une simplification parfois controversée. Dans la suite, on négligera cet effet en identifiant les coefficients de diffusion en phase libre et effectifs :

$$\bar{D}^i_\alpha \equiv D^i_\alpha \ , \ i \in \{w, h\} \ , \ \alpha \in \{l, g\} \tag{4.10}$$

Remarquons enfin que la diffusion moléculaire dans une phase α n'apporte aucune contribution au déplacement globale de cette phase, *i.e.* $\sum_i \mathbf{j}^i_\alpha = 0$. Dans le cas d'un système binaire (par exemple le eau/hydrogène étudié) la relation (4.8) implique que $\nabla X^w_\alpha = -\nabla X^h_\alpha$ et donc

$$M^h D^h_\alpha = M^w D^w_\alpha \ , \ \alpha \in \{l, g\} \tag{4.11}$$

4.2.5 Pression capillaire

De manière générale, la pression capillaire ($ML^{-1}T^{-2}$) est définie comme la différence des pressions de deux fluides immiscibles de part et d'autre de l'interface les séparant. Cette différence est due à la courbure de l'interface, la pression du fluide du côté concave de l'interface étant supérieure à celle du côté convexe. Dans un tube (ou dans un pore), le sens de la courbure de l'interface entre les deux fluides provient de la capacité plus ou moins grande de chaque fluide à "mouiller" la paroi solide. Ainsi dans le cas liquide/gaz, le liquide est (à de rares exceptions près) le fluide le plus mouillant et donc la pression du gaz est supérieure à celle du liquide.

Pour un mélange fluide réparti dans les pores d'un milieu poreux, la géométrie de l'interface est extrêmement complexe. Les expérimentations font néanmoins apparaître que la pression capillaire dépend essentiellement de la saturation et ceci d'une manière monotone. Plusieurs facteurs affectent les propriétés capillaires des milieux poreux, parmi lesquels on peut peut noter : la dimension et la distribution des pores ; les fluides et les solides impliqués ; l'histoire de saturation. Ce dernier point traduit l'observation expérimentale d'un phénomène d'hystérésis. Par exemple, dans le cas d'un mélange fluide liquide/gaz dans une colonne de roche, la relation pression capillaire-saturation change selon que le gaz déplace le liquide (*drainage*) ou bien que le liquide déplace le gaz (*imbibition*). Dans des configurations plus complexes, la distinction drainage/imbibition s'avère délicate et la modélisation générale de ce phénomène d'hystérésis est encore discutée aujourd'hui.

Dans toute la suite, on négligera le phénomène d'hystérésis de la pression capillaire et l'on exprimera la pression capillaire comme une fonction univoque de la saturation. Pour

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

une configuration liquide/gaz, on définit donc

$$p_g - p_l = p_c(S_g) \tag{4.12}$$

En reprenant les remarques faites au-dessus, la fonction de pression capillaire $p_c(S_g)$ vérifie

$$p_c \geq 0 \quad \text{et} \quad p_c' \geq 0 \tag{4.13}$$

Toujours dans le cas liquide/gaz, on observe qu'il existe une saturation résiduelle (*s.d.*) en liquide, $S_{l,res}$, qui correspond à la saturation où le liquide ne forme plus une phase continue dans les pores et ne peut alors plus s'écouler. La perte de continuité hydraulique implique que la pression capillaire peut croître indéfiniment sans pour autant réduire la saturation du liquide S_l sous sa valeur résiduelle $S_{l,res} \geq 0$. Autrement dit, on a

$$\lim_{\substack{S_g \to 1-S_{l,res} \\ S_g < 1-S_{l,res}}} p_c(S_g) = +\infty \tag{4.14}$$

A l'inverse, le gaz étant moins mouillant que le liquide, on n'observe pas de saturation résiduelle en gaz ($S_{g,res} = 0$) et la quantité $p_c(S_g = 0)$ peut donc être considérée. Cette quantité n'est pas forcément nulle et correspond alors à la pression capillaire minimum qu'il faut appliquer pour que le gaz déplace le liquide au niveau des pores. On parle de *pression d'entrée* ou de *pression de déplacement*. La figure 4.1 représente l'allure générale d'un courbe de pression capillaire, on y retrouve la pression d'entrée et la saturation liquide résiduelle ainsi que l'absence de saturation résiduelle pour le gaz.

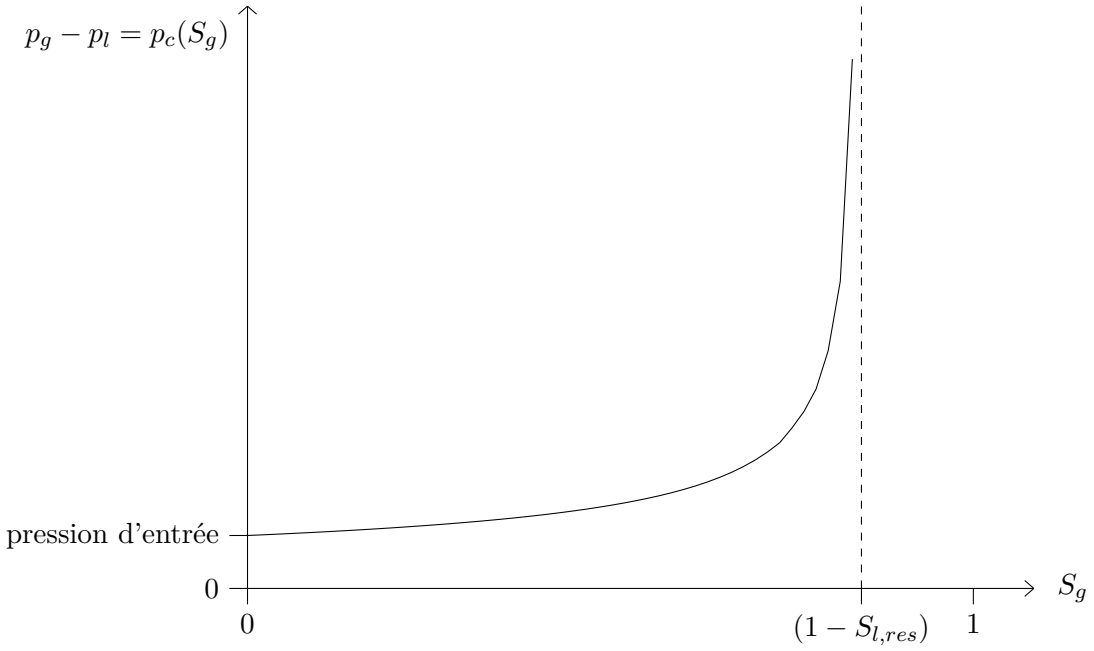


FIGURE 4.1 – Représentation schématique de la courbe de pression capillaire

4.2.6 Équilibre thermodynamique

On considère un système thermodynamique binaire de deux corps purs (ici les composants eau, w, et hydrogène, h), chacun présent dans deux phases (ici les phases liquide, l

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

et gaz, g). Lorsque ce système binaire est à l'équilibre thermodynamique, la composition d'une phase est reliée à la composition de l'autre phase.

Plus précisément, on supposera que la phase gazeuse est un gaz parfait, c'est-à-dire que les molécules de la phase gazeuse n'interagissent pas entre elles. Sous cette hypothèse, on peut utiliser la loi de Dalton

$$p_g = p_g^w + p_g^h \tag{4.15}$$

qui introduit les pressions partielles ($ML^{-1}T^{-2}$) de la vapeur d'eau p_g^w et de l'hydrogène gazeux p_g^h. Chacune des pressions partielles vérifiant la loi des gaz parfaits

$$p_g^w = \frac{\rho_g^w}{M^w} R\theta \quad \text{et} \quad p_g^h = \frac{\rho_g^h}{M^h} R\theta \tag{4.16}$$

où θ est la température (Θ) du gaz et R la constante universelle des gaz parfaits ($ML^2T^{-2}\Theta^{-1}N^{-1}$). L'équilibre thermodynamique du système binaire implique que la pression partielle du composant i dépend de la composition de la phase liquide et peut s'écrire d'une manière générale sous la forme

$$p_g^i = \mathfrak{G}^i(X_l^i) \tag{4.17}$$

où X_l^i est la fraction molaire du composant i dans le liquide (voir (4.8)). Notons ici que $\mathfrak{G}^i$ n'est pas intrinsèque au composant i mais dépend entre autre des autres composants et de la température.

Dans le cas où un composant prédomine fortement sur l'autre dans la composition de la phase liquide, on distingue le solvant (composant majoritaire) du soluté (composant minoritaire). Pour la phase liquide, on supposera dans la suite que l'eau est le solvant et l'hydrogène le soluté et que la solution liquide est une solution diluée idéale. Ceci suppose en particulier que $X_l^h \ll 1$ et l'on aura donc au première ordre

$$X_l^h \approx \frac{c_l^h}{c_l^w} = \frac{M^w}{\rho_l^w M^h} \rho_l^h \tag{4.18}$$

Sous l'hypothèse d'une solution diluée idéal, la relation (4.17) se réduit alors, en première approximation, à une relation linéaire et donne :

– pour le solvant (ici l'eau), la *loi de Raoult*

$$p_g^w = \hat{p}_g^w X_l^w \tag{4.19}$$

où $\hat{p}_g^w$ est la pression de vapeur saturante ($ML^{-1}T^{-2}$) de l'eau pure qui dépend de la température.

– pour le soluté (ici l'hydrogène), la *loi de Henry*

$$p_g^h = K^h X_l^h$$

où K^h est un coefficient dépendant de la température.

L'approximation (4.18) permet encore de réécrire cette dernière relation sous la forme

$$\rho_l^h = H M^h p_g^h \tag{4.20}$$

où H est la constante de Henry ($NT^2M^{-1}L^{-2}$), encore appelée coefficient de solubilité du gaz dans le solvant, et dépend de la température.

Si l'on considère que le mélange binaire rempli les pores d'un milieu poreux, la loi de Raoult (equation (4.19)) doit être modifiée pour prendre en compte le fait qu'une forte

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

courbure de l'interface entre les deux phases diminue localement la pression de vapeur saturante de l'eau. Ce phénomène est décrit par *l'équation de Kelvin*. On en déduit dans le cadre des milieux poreux la loi de Raoult-Kelvin (voir [Fir99]) :

$$p_g^w = \hat{p}_g^w X_l^w \exp\left(\frac{-M^w p_c}{R\theta\rho_l}\right) \tag{4.21}$$

4.2.7 Hypothèses physiques du modèle

On vient de présenter, à travers les sections 4.2.1 à 4.2.6, l'ensemble des phénomènes physiques impliqués dans l'écoulement diphasique eau/hydrogène en milieux poreux. Cette modélisation physique suppose :

- que le milieu poreux est indéformable (porosité constante) ;
- et que le mélange fluide est à l'équilibre thermodynamique à chaque instant.

Des hypothèses simplificatrices ont aussi été introduites, on a supposé :

- que la diffusion moléculaire n'est pas gênée par la matrice rocheuse (relation (4.10)) ;
- qu'il n'y a pas d'hystérésis dans le phénomène de pression capillaire (relation (4.12)) ;
- et que la phase liquide forme une solution idéale diluée, ce qui conduit à l'utilisation des lois de Raoult et de Henry (relations (4.19) et (4.20)).

Cependant, le modèle ainsi obtenu n'est pas encore fermé. D'un point de vue physique, il reste à intégrer les transferts de chaleur d'une part, et la compressibilité de l'eau d'autre part. Ces deux points ne sont pas abordés dans cette étude et l'on supposera :

- que l'écoulement du mélange fluide est isotherme, *i.e.*

$$\theta = Constante \quad \text{en tous points et en tous temps} \tag{4.22}$$

- et que l'eau pure est incompressible, *i.e.*

$$\rho_l^w = Constante \quad \text{en tous points et en tous temps} \tag{4.23}$$

On peut voir que dans les configurations qui nous intéressent, la migration d'hydrogène dans un stockage géologique de déchets radioactifs, la phase gazeuse est majoritairement composée d'hydrogène. En effet, en reprenant les relations (4.8), (4.15) et (4.16), la fraction molaire de vapeur d'eau dans le gaz peut s'écrire $X_g^w = p_g^w/p_g$. Les relations (4.13) et (4.19) nous donne alors l'inégalité $X_g^w \leq \hat{p}_g^w/p_l$; en considérant la pression hydrostatique (fonctions de la profondeur) pour la valeur de p_l, on obtient, pour les conditions de température et de profondeur d'un stockage, $X_g^w \leq 4\,10^{-3}$. C'est pourquoi on négligera dans la suite la vapeur d'eau. Ceci revient simplement à supposer que la pression de vapeur d'eau saturante est nulle :

$$\hat{p}_g^w \equiv 0 \tag{4.24}$$

Les conséquences directes de cette hypothèse sont que $\rho_g^w = 0$ et $p_g^w = 0$, on en déduit les simplifications suivantes

$$p_g = p_g^h \ ; \ \rho_g = \rho_g^h \ \text{ et } \ \mathbf{j}_g^h = \mathbf{j}_g^w = 0 \tag{4.25}$$

4.2.8 Équations de l'écoulement

Introduisons la notion de concentration massique *standard* pour chaque phase, liquide et gaz. Celle-ci se définit comme la masse volumique de la phase "pure", c'est-à-dire contenant uniquement son composant "naturel" (l'eau pour le liquide et l'hydrogène pour le gaz), dans les conditions standards de pression et de température. On note ρ_l^{std} et ρ_g^{std} la

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

concentration massique standard respectivement du liquide et du gaz. L'eau étant supposée incompressible (voir (4.23)), on en déduit que $\rho_l^w = \rho_l^{std}$.

En intégrant l'hypothèse d'une phase gazeuse uniquement constituée d'hydrogène (relation (4.24)) aux équations de conservation de la masse (équations (4.4) et (4.5)), on obtient les équations simplifiées suivantes

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi S_l\right) + \operatorname{div}\left(\mathbf{q}_l + \frac{1}{\rho_l^{std}}\mathbf{j}_l^w\right) = \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}} \tag{4.26}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi S_l \frac{\rho_l^h}{\rho_g^{std}} + \Phi S_g \frac{\rho_g^h}{\rho_g^{std}}\right) + \operatorname{div}\left(\frac{\rho_l^h}{\rho_g^{std}}\mathbf{q}_l + \frac{\rho_g^h}{\rho_g^{std}}\mathbf{q}_g + \frac{1}{\rho_g^{std}}\mathbf{j}_l^h\right) = \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}} \tag{4.27}$$

où la première équation a été divisée par ρ_l^{std} et la seconde par ρ_g^{std}.

Pour simplifier l'expression de l'équation (4.27), on définit la concentration massique d'hydrogène dissout normalisée :

$$R_s = \frac{\rho_l^h}{\rho_g^{std}} \tag{4.28}$$

En prenant en compte le fait que $p_g = p_g^h$ et que $\rho_g = \rho_g^h$, la loi de Henry (voir (4.20)) se réécrit alors

$$R_s = C_h p_g \tag{4.29}$$

et la loi des gaz parfaits (voir (4.16)) devient

$$\frac{\rho_g^h}{\rho_g^{std}} = C_v p_g$$

où l'on introduit les constantes

$$C_h = \frac{HM^h}{\rho_g^{std}} \quad \text{et} \quad C_v = \frac{M^h}{R\theta\rho_g^{std}} \tag{4.30}$$

La relation (4.11) nous permet d'écrire que $\mathbf{j}_l^h = -\mathbf{j}_l^w$. Définissons le flux massique normalisé $\mathbf{J} \equiv \frac{1}{\rho_g^{std}}\mathbf{j}_l^h$ et introduisons la constante

$$G = \frac{\rho_l^{std}}{\rho_g^{std}} \tag{4.31}$$

On a alors $\frac{1}{\rho_l^{std}}\mathbf{j}_l^w = -\frac{1}{G}\mathbf{J}$. En suivant la définition de $\mathbf{j}_l^h$, le flux $\mathbf{J}$ peut s'écrire

$$\mathbf{J} = -\frac{\Phi S_l F}{R_s + F} D_l^h \nabla R_s \tag{4.32}$$

où l'on introduit la constante

$$F = \frac{M^h \rho_l^{std}}{M^w \rho_g^{std}} \tag{4.33}$$

Finalement, les équations (4.26) et (4.27) peuvent s'écrire sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi S_l\right) + \operatorname{div}\left(\mathbf{q}_l - \frac{1}{G}\mathbf{J}\right) = \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}} \tag{4.34}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi(S_l R_s + C_v S_g p_g)\right) + \operatorname{div}\left(R_s\mathbf{q}_l + C_v p_g \mathbf{q}_g + \mathbf{J}\right) = \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}} \tag{4.35}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

où le flux $\mathbf{J}$ est donné par l'équation (4.32) et où les vitesses d'écoulement $\mathbf{q}_l$ et $\mathbf{q}_g$ (voir (4.6)) peuvent s'écrire

$$\mathbf{q}_l = -\mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_l)}{\mu_l}\left(\nabla p_l - (\rho_l^{std} + R_s\rho_g^{std})\mathbf{g}\right) \tag{4.36}$$

$$\mathbf{q}_g = -\mathbb{K}\frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g}\left(\nabla p_g - C_v\rho_g^{std}p_g\mathbf{g}\right) \tag{4.37}$$

L'écoulement diphasique eau/hydrogène est ainsi décrit par le jeu d'équations (4.34)-(4.35)-(4.32)-(4.36)-(4.37) complétées des relations (4.1)-(4.12)-(4.29) où interviennent les 8 inconnues suivantes : S_l, S_g, p_l, p_g, R_s, $\mathbf{q}_l$, $\mathbf{q}_g$ et $\mathbf{J}$. Ce système d'équation est valable lorsque les deux phases, liquide et gaz, sont présentes. Avec le cadre physique exposé ci-dessus, il est aussi possible de décrire le transport de l'hydrogène dans un milieu poreux entièrement saturé par la phase liquide, c'est-à-dire quand la phase gazeuse n'existe pas. Dans cette situation, on a les simplifications suivantes :

- $S_l \equiv 1$ car le milieu poreux est entièrement saturé de liquide. D'après la relation (4.1), on en déduit $S_g \equiv 0$.
- L'hydrogène n'est plus présent que sous forme dissoute dans la phase liquide. En conséquence, le terme $\Phi(S_l R_s + C_v S_g p_g)$ de l'équation (4.35) se réduit à ΦR_s.
- De même, le flux d'hydrogène n'est plus dû qu'à l'écoulement de phase liquide d'une part, et à la diffusion de l'hydrogène dissout dans le liquide d'autre part. La contribution due à l'écoulement du gaz n'ayant plus lieu d'être, on peut donc poser $\mathbf{q}_g \equiv 0$.

Ainsi, les équations (4.34) et (4.35) deviennent

$$\mathrm{div}\left(\mathbf{q}_l - \frac{1}{G}\mathbf{J}\right) = \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}} \tag{4.38}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi R_s\right) + \mathrm{div}\left(R_s\mathbf{q}_l + \mathbf{J}\right) = \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}} \tag{4.39}$$

la vitesse d'écoulement du liquide devient

$$\mathbf{q}_l = -\mathbb{K}\frac{1}{\mu_l}\left(\nabla p_l - (\rho_l^{std} + R_s\rho_g^{std})\mathbf{g}\right) \tag{4.40}$$

et le flux diffusif devient

$$\mathbf{J} = -\frac{\Phi F}{R_s + F}D_l^h\nabla R_s \tag{4.41}$$

Les 4 inconnues p_l, R_s, $\mathbf{q}_l$ et $\mathbf{J}$ munies des équations (4.38), (4.39), (4.40) et (4.41) décrivent alors entièrement le transport d'hydrogène en milieux poreux entièrement saturé de liquide.

4.2.9 Condition d'existence de la phase de gaz

Comme on vient de le voir dans la section précédente, le cadre physique exposé dans ce chapitre est en mesure de décrire aussi bien le cas diphasique (liquide/gaz) que le cas monophasique (liquide seul). On verra dans le chapitre suivant qu'il est possible d'unifier ces deux descriptions. Mais ceci nécessite avant tout d'être capable de savoir si, localement, la phase de gaz est effectivement présente ou non, autrement dit il nous faut établir un critère déterminant si l'écoulement est *insaturé* (les deux phases sont présentes, $S_g > 0$) ou *saturé* (seule la phase liquide est présente, $S_g = 0$).

La température étant supposée constante et le gaz pur, l'état de la phase gazeuse, quand elle existe, est entièrement décrit par sa pression, p_g. Comme on l'a vu, la pression

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

du gaz doit satisfaire, d'une part, l'équilibre capillaire à travers la loi de pression capillaire (voir équation (4.12)) et, d'autre part, l'équilibre thermodynamique à travers la loi de Henry (voir équation (4.29) et section 4.2.6). Les propriétés de la pression capillaire nous donne que, lorsque le gaz est présent, sa pression doit satisfaire la relation : $p_g \geq p_l + p_c(0)$. Or la loi de Henry impose la pression du gaz quand la concentration d'hydrogène dissout est donnée : $p_g = R_s/C_h$. Selon les valeurs que prennent la pression liquide p_l et la concentration d'hydrogène dissout R_s, ces deux conditions ne sont pas forcément vérifiées simultanément.

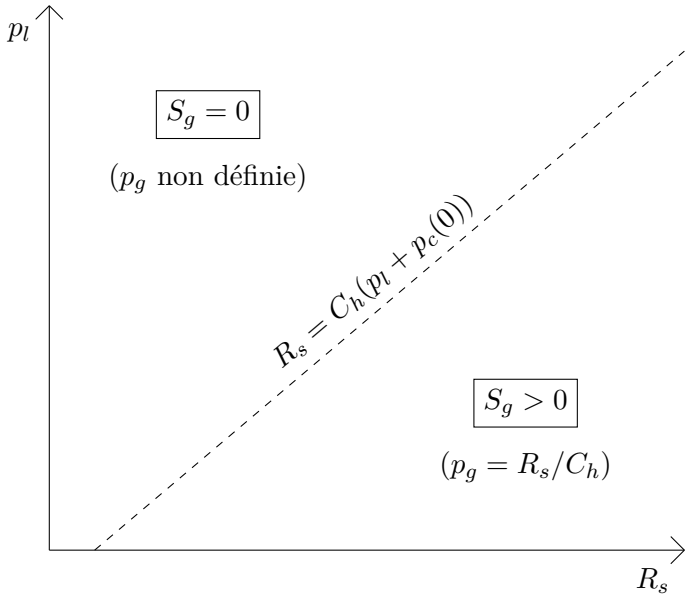


FIGURE 4.2 – Existence de la phase gaz dans le diagramme (R_s, p_l)

Ainsi, lorsque $R_s > C_h(p_l + p_c(0))$, la phase gazeuse peut exister et satisfaire les deux équilibres, capillaire et thermodynamique. A l'inverse, lorsque $R_s < C_h(p_l + p_c(0))$, la pression du liquide et les effets capillaires sont trop forts pour permettre au gaz d'exister à l'équilibre thermodynamique. On voit apparaître dans cette analyse la valeur limite $R_s = C_h(p_l + p_c(0))$ qui correspond à la concentration d'hydrogène dissout maximale (l'eau sera dite *saturée* en hydrogène) dans une phase liquide saturant le milieu poreux pour une pression liquide p_l donnée. La figure 4.2 résume cette analyse dans un diagramme concentration d'hydrogène-pression liquide dans lequel on peut distinguer la région où l'écoulement est saturé ($S_g = 0$) et celle où l'écoulement est insaturé ($S_g > 0$).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 5

Modélisation

Le chapitre précédent nous fournit un cadre conceptuel physique pour décrire l'écoulement du mélange eau/hydrogène dans un milieu poreux en présence de deux phases, liquide et gaz, mais aussi lorsque la phase gaz est absente. Il s'agit donc désormais de faire entrer cette description physique dans une formulation mathématique consistante.

La première section de ce chapitre propose une revue des différentes approches existantes. On s'intéresse en particulier aux moyens envisagés pour faire coexister les deux types de régimes (liquide/gaz et liquide seul). La seconde section expose une approche nouvelle basée sur un choix judicieux des variables principales du modèle et qui conduit à une formulation unifiée des deux régimes. Dans la dernière section, on procède à l'adimensionnement du modèle obtenu, ce qui nous permet enfin d'effectuer certaines simplifications dans le cas d'un site de stockage.

5.1 Les problèmes

La question des écoulements multiphasiques dans le domaine des stockages géologiques de déchets radioactifs est une préoccupation récente. Historiquement, le développement poussé des connaissances sur les écoulements multiphasiques en milieux poreux remonte à une quarantaine d'années et fut impulsé par l'exploitation des réserves pétrolières. Quand cette problématique est apparue dans l'ingénierie des stockages géologiques, la communauté s'est naturellement tournée vers le savoir-faire des pétroliers.

Il faut toutefois souligner que, si la physique sous-jacente est commune, les phénomènes qui prédominent dans chaque domaine peuvent être très différents. Notons par exemple que les échelles de temps intervenant dans l'exploitation pétrolière sont inférieures à l'année tandis que dans le stockage géologique elles sont supérieures au millier d'années. La nature des composants diffèrent également : eau/hydrogène, dans notre étude, pour le stockage géologique ; eau/"huile" pour les réservoirs de pétrole.

5.1.1 De l'introduction d'une saturation résiduelle de gaz non nulle

Dans l'ingénierie pétrolière, on trouve toute une classe de problèmes d'écoulements diphasiques "purement" insaturés, c'est-à-dire où les deux phases sont toujours présentes. C'est par exemple le cas dans un écoulement eau/"huile" où il existe une saturation résiduelle (voir section 4.2.5) pour les deux phases (l'eau et l'huile).

Une première approche possible développée dans l'ingénierie des stockages géologiques a été d'utiliser ce même type de modèle, et les méthodes de calcul associées, à la situation eau/hydrogène en supposant *a priori*, sans que cela ne corresponde forcément à la physique,

qu'il existe toujours une saturation résiduelle non nulle pour la phase gazeuse, $S_{g,res} > 0$. Comme on l'a mentionné en section 4.2.5, cette saturation résiduelle de gaz n'existe pas. L'idée est donc de fixer cette saturation résiduelle de manière arbitrairement petite : $S_{g,res} = \varepsilon > 0$. La validation d'une telle approche passe en premier lieu par l'étude de la stabilité de la solution quand $S_{g,res} \to 0$. Des validations de ce type ont été menée au niveau numérique et leurs conclusions sont positives : pour une saturation résiduelle de gaz, $S_{g,res}$, suffisamment petite, la valeur de $S_{g,res}$ n'a pas d'influence quantifiable sur la solution.

Limites d'un modèle avec saturation résiduelle de gaz artificielle

Néanmoins, ceci ne garantit pas l'équivalence entre le modèle limite ($S_{g,res} \to 0$) et le modèle sans saturation résiduelle de gaz ($S_{g,res} = 0$). Pour comprendre le biais induit par l'introduction de $S_{g,res} > 0$, il faut reprendre le diagramme concentration d'hydrogène/pression liquide présenté en figure 4.2. Sur la figure 5.1, on a reproduit ce diagramme en y faisant apparaître la région des états inaccessibles (zone hachurée) par un modèle avec saturation résiduelle de gaz $S_{g,res} = \varepsilon$. Cette région correspond aux états du mélange fluide où $S_g < \varepsilon$.

Lorsque $\varepsilon \to 0$, la région des états inaccessibles tend vers la zone caractérisée par $R_s < C_h(p_l + p_c(0))$. C'est-à-dire que, dans le modèle limite ($S_{g,res} \to 0$), lorsque la phase liquide sature le milieu poreux ($S_g = 0$), le liquide est nécessairement *saturé* en hydrogène dissout ($R_s = C_h(p_l + p_c(0))$). Il y a donc une nette différence avec le modèle sans saturation résiduelle de gaz dans lequel la concentration d'hydrogène dissout, R_s, peut varier de 0 à $C_h(p_l + p_c(0))$ lorsque le liquide sature le milieu poreux.

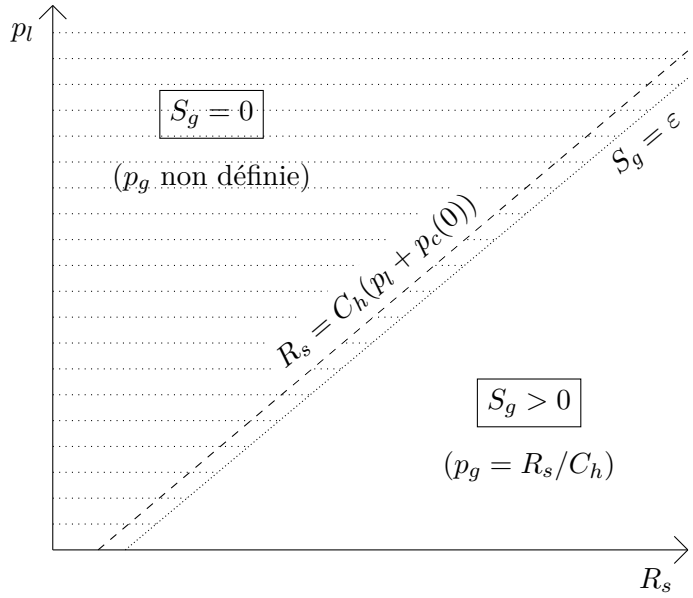


FIGURE 5.1 – Effet de la saturation résiduelle de gaz dans le diagramme (R_s, p_l)

Notons que le fait d'imposer que le liquide soit toujours saturé en hydrogène dissout peut avoir des conséquences sur le transport de l'hydrogène, en particulier dans une configuration de stockage géologique. En effet, le mécanisme de diffusion de l'hydrogène dissout dans le liquide est alors "bloqué". L'hydrogène ne pouvant être transporté que par la convection de la phase gazeuse, il y a une tendance à voir le gaz monter significativement en pression afin de développer une grande zone insaturée pour permettre à l'hydrogène

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

s'échapper du stockage. Remarquons ensuite qu'il n'est pas possible de modéliser de l'eau pure ($R_s = 0$) ce qui est pourtant l'état "naturel" du liquide en dehors de la zone de stockage. Enfin se pose la question du respect du principe de conservation de la masse lorsque l'état du système se rapproche fortement de la limite $S_g = \varepsilon$.

5.1.2 Du traitement de la disparition du gaz

L'analyse des effets de l'introduction *a priori* d'une saturation résiduelle de gaz artificiellement non nulle comme l'on vient de l'expliquer nous mène naturellement à vouloir plutôt considérer pleinement le couplage des écoulements insaturés et saturés. On dispose pour cela de tous les éléments nécessaires : les équations décrivant les deux types d'écoulements (voir section 4.2.8) et un critère déterminant localement la nature de l'écoulement (voir section 4.2.9).

Classiquement, le problème de l'écoulement insaturé (équations (4.34)-(4.35)-(4.32)-(4.36)-(4.37) complétées des relations (4.1)-(4.12)-(4.29)) est traité avec (p_l, S_l) ou (p_l, p_g) comme variables principales tandis que le problème de l'écoulement saturé (équations (4.38), (4.39), (4.40) et (4.41)) est traité avec (p_l, R_s) comme variables principales. Dans l'état saturé, la pression de gaz, p_g, n'est pas définis et la saturation liquide, S_l, est constante égal à 1, les variables principales usuelles décrivant l'écoulement insaturé ne sont donc plus pertinentes lorsque l'écoulement passe dans un régime saturé.

Une première façon d'envisager le couplage de ces deux types d'écoulements est décrite dans l'ouvrage [CHM06] de Chen, Huan et Ma traitant plus particulièrement des problématiques propres au domaine pétrolier. Le chapitre 8 de [CHM06] traite du modèle "black oil" qui décrit un écoulement eau/"huile"/gaz où le gaz peut disparaître. Plusieurs méthodes de résolution du modèle sont décrites, toutes traitant la disparition du gaz de la même manière. Pour un pas de temps de la résolution, la non linéarité du problème est résolue par une méthode itérative de type Newton-Raphson dans laquelle on vérifie à chaque itéré l'état local du mélange fluide pour déterminer quelles équations et quelles inconnues doivent être utilisées dans la résolution du problème linéarisé. Ici, l'unification des deux types d'écoulement (avec ou sans gaz) n'est donc pas réalisée au niveau du modèle mais au niveau du processus de résolution numérique.

Une autre approche a été proposée par J. Jaffré dans [JS09] pour l'écoulement eau/hydrogène. Le couplage des deux écoulements est effectué en travaillant non plus avec deux variables principales mais trois. Via une discussion analogue à celle faite en section 4.2.9, une contrainte de "complémentarité" sur les trois inconnues est obtenue, ce qui ferme la formulation. Pour un pas de temps fixé, les équations discrétisées de l'écoulement saturé/insaturé sont alors ramenées à un problème de complémentarité non linéaire qui rentre dans le cadre général de l'optimisation numérique. Comme au dessus, l'unification des deux types d'écoulement a lieu au niveau de la résolution numérique.

5.2 Une solution

Plutôt que d'envisager une manière de faire cohabiter les modèles respectifs des écoulements saturés et insaturés dans une méthode numérique qui déterminerait au cas par cas le modèle à utiliser en chaque point de l'espace, on s'intéresse à la construction d'un unique modèle qui engloberait les deux types d'écoulements. Outre le gain dans la simplicité de l'implémentation, un tel modèle "unifié" nous permettra d'utiliser des outils d'analyse mathématiques puissants de manière naturelle. En particulier, on montrera des éléments de résultat sur l'existence de solutions au chapitre 6 et on mettra en place un

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

processus d'homogénéisation au chapitre 9.

5.2.1 Un modèle unifié pour les écoulements saturés/insaturés

Notons tout d'abord f la fonction inverse de la pression capillaire (voir équation (4.12)) :

$$\begin{array}{rccc} f: & [p_c(0);+\infty[& \longrightarrow & [0;1] \\ & \pi & \longrightarrow & p_c^{-1}(\pi) \end{array}$$

On déduit des propriétés de $p_c(S_g)$ (relations (4.13) et (4.14)) que f vérifie

$$f(p_c(0)) = 0\ , \quad f' \geq 0 \quad \text{et} \quad \lim_{\pi \to +\infty} f(\pi) = 1 - S_{l,res} \tag{5.1}$$

De part la définition de la pression capillaire, quand $p_g \geq p_l + p_c(0)$, il existe $S_g \in [0;1]$ tel que $p_g = p_l + p_c(S_g)$ et on a donc $S_g = f(p_g - p_l)$. Reprenons maintenant la loi de Henry (équation (4.29)), en faisant apparaître son domaine de validité on peut l'écrire :

$$p_g \mathbb{1}_{\{R_s \geq C_h(p_l + p_c(0))\}} = \frac{R_s}{C_h} \mathbb{1}_{\{R_s \geq C_h(p_l + p_c(0))\}}$$

où $\mathbb{1}_{\mathcal{B}}$ désigne la fonction indicatrice de l'ensemble $\mathcal{B}$. On a donc que la saturation en gaz, S_g, peut s'exprimer en fonction de la concentration d'hydrogène dissout, R_s, et de la pression du liquide, p_l comme suit

$$S_g = \begin{cases} f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right) & \text{si } \frac{R_s}{C_h} - p_l \geq p_c(0) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.2}$$

Ceci nous amène naturellement à prolonger f sur $]-\infty; p_c(0)]$ par 0, de sorte que l'on écrira la relation (5.2) tout simplement sous la forme :

$$S_g = f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right) \tag{5.3}$$

où $f : \mathbb{R} \to [0;1]$ est une fonction continue et croissante (d'après (5.1)) définie par

$$f(\pi) = \begin{cases} p_c^{-1}(\pi) & \text{si } \pi \geq p_c(0) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{5.4}$$

La figure 5.2 rappelle l'allure de la fonction $p_c(S_g)$ telle qu'elle est présentée en figure 4.1 (voir section 4.2.5) et représente la fonction f construite à partir de celle-ci.

On peut désormais reprendre les équations (4.34)-(4.35)-(4.32)-(4.36)-(4.37) complétées des relations (4.1)-(4.12)-(4.29) qui décrivent l'écoulement insaturé et les réécrire avec p_l et R_s comme variables principales. On obtient le système suivant

$$-\frac{\partial}{\partial t}\left(\Phi f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right)\right) - \operatorname{div}(A_{1,1}\nabla p_l + A_{1,2}\nabla R_s + B_1) = \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}} \tag{5.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi a \circ f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right) R_s) - \operatorname{div}(A_{2,1}\nabla p_l + A_{2,2}\nabla R_s + B_2) = \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}} \tag{5.6}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

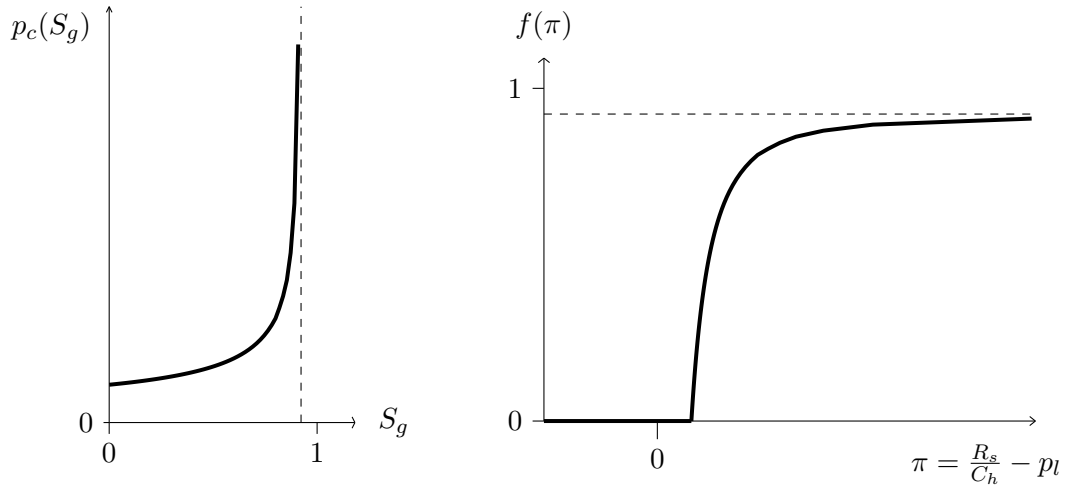


FIGURE 5.2 – Représentation schématique de la fonction f décrivant $S_g = f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right)$ et construite à partir de $P_c(S_g)$

où

$$A_{1,1} = \mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l} \tag{5.7}$$

$$A_{1,2} = -\frac{F}{G}\frac{\Phi(1-S_g)}{F+R_s}D_l^h \tag{5.8}$$

$$A_{2,1} = \mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l}R_s \tag{5.9}$$

$$A_{2,2} = \mathbb{K}\frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g}\frac{\omega}{C_h}R_s + \frac{\Phi F(1-S_g)}{F+R_s}D_l^h \tag{5.10}$$

$$B_1 = -\mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l}(\rho_l^{std} + \rho_g^{std}R_s)\mathbf{g} \tag{5.11}$$

$$B_2 = -\mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l}(\rho_l^{std} + \rho_g^{std}R_s)R_s\mathbf{g} - \mathbb{K}\frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g}\rho_g^{std}\omega^2 R_s^2\mathbf{g} \tag{5.12}$$

avec

$$a : S_g \to 1 + (\omega - 1)S_g \quad ; \quad \omega = \frac{C_v}{C_h} \tag{5.13}$$

La définition de f (relation (5.4)) nous permet de considérer le système (5.5)-(5.6) également dans le cas totalement saturé ($S_g = 0$), c'est-à-dire quand $R_s < C_h(p_l + p_c(0))$. Dans ce cas, on obtient alors, compte tenu des propriétés des fonctions de perméabilité relative $k_{r,l}$ et $k_{r,g}$ (voir section 4.2.3), le système suivant

$$-\operatorname{div}(\mathbb{K}\frac{1}{\mu_l}\nabla p_l - \frac{1}{G}\frac{\Phi F}{F+R_s}D_l^h\nabla R_s - \mathbb{K}\frac{1}{\mu_l}(\rho_l^{std} + \rho_g^{std}R_s)\mathbf{g}) = \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}}$$

$$\frac{\partial \Phi R_s}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbb{K}\frac{R_s}{\mu_l}\nabla p_l + \frac{\Phi F}{F+R_s}D_l^h\nabla R_s - \mathbb{K}\frac{1}{\mu_l}(\rho_l^{std} + \rho_g^{std}R_s)R_s\mathbf{g}) = \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}}$$

qui correspond exactement au système d'équations (4.38), (4.39), (4.40) et (4.41) et qui décrit l'écoulement saturé avec p_l et R_s comme variables principales.

En conclusion, le système (5.5)-(5.6) décrit aussi bien l'écoulement insaturé que l'écoulement saturé et constitue ainsi un modèle unifié pour les écoulements saturés/instaurés.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Pour parvenir à ce résultat, le choix des variables principales s'est avéré une étape essentielle. En effet, on a vu que les variables usuelles, (p_l, S_l) ou (p_l, p_g), ne sont plus valables dans le cas saturé et ne donc pas être utilisées dans les deux régimes d'écoulement. A la place, on propose ici d'utiliser plutôt le jeu de variables (p_l, R_s) qui lui reste, ainsi qu'on la montré dans cette section, valable dans les deux cas.

5.2.2 Une première analyse du modèle

On peut voir que, dans le système (5.5)-(5.6), l'équation (5.5) est une équation aux dérivées partielles parabolique/elliptique en p_l (pression du liquide) et que l'équation (5.6) est une équation au dérivées partielles parabolique en R_s (concentration d'hydrogène dissout). En ce sens, on parlera pour simplifier de l'équation (5.5) comme de "l'équation en pression" et de l'équation (5.6) comme de "l'équation en concentration".

En effet, l'équation (5.5) se développe comme suit :

$$\Phi f'\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right)\frac{\partial p_l}{\partial t} - \operatorname{div}(A_{1,1}\nabla p_l + A_{1,2}\nabla R_s + B_1) - \frac{1}{C_h}\Phi f'\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right)\frac{\partial R_s}{\partial t} = \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}}$$

Or

$$\Phi f'\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right) \geq 0$$

et, pour ξ un vecteur quelconque, on a

$$A_{1,1}\xi \cdot \xi = \frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l}\mathbb{K}\xi \cdot \xi$$

qui est strictement positif compte tenu des propriétés de $\mathbb{K}$ et de $k_{r,l}$. L'équation (5.5) est donc bien parabolique/elliptique en p_l.

De même, l'équation (5.6) peut se développer ainsi

$$\Phi\left(a(S_g) + R_s\frac{\partial a(S_g)}{\partial R_s}\right)\frac{\partial R_s}{\partial t} - \operatorname{div}(A_{2,2}\nabla R_s + A_{2,1}\nabla p_l + B_1) + \Phi R_s\frac{\partial a(S_g)}{\partial p_l}\frac{\partial p_l}{\partial t} = \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}}$$

Or, d'après la relation (5.13) et du fait que f et f' sont toutes deux positives, on a

$$\begin{aligned} a(S_g) + R_s\frac{\partial a(S_g)}{\partial R_s} &= 1 + (\omega - 1)\left(f\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right) + \frac{R_s}{C_h}f'\left(\frac{R_s}{C_h} - p_l\right)\right) \\ &\geq 1 \end{aligned}$$

De plus, pour ξ un vecteur quelconque, on a

$$A_{2,2}\xi \cdot \xi = \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g}\frac{\omega}{C_h}R_s\mathbb{K}\xi \cdot \xi + \frac{\Phi F(1 - S_g)}{F + R_s}D_l^h|\xi|^2$$

qui est strictement positif. L'équation (5.5) est donc bien parabolique/elliptique en R_s.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

5.2.3 Retour sur le choix des variables

Comme on l'a vu, le choix du jeu de variables est une étape essentielle pour décrire conjointement les écoulements saturés et insaturés. Le système (5.5)-(5.6) est écrit avec le couple (p_l, R_s) comme variables principales mais d'autres choix sont possibles.

Par exemple, dans un travail précédent (voir [BJS09]), il a été proposé de prendre le couple (p_l, X) où X est la concentration massique d'hydrogène *totale* normalisée qui est définie comme le bilan des concentrations d'hydrogène dans chaque phase :

$$X \equiv \frac{S_l \rho_l^h + S_g \rho_g^h}{\rho_g^{std}}$$

Cette expression pouvant se réduire ainsi :

$$\begin{aligned} X &= \frac{S_l \rho_l^h + S_g \rho_g^h}{\rho_g^{std}} = (1 - S_g)\frac{\rho_l^h}{\rho_g^{std}} + S_g \frac{1}{\rho_g^{std}} \frac{M^h}{R\theta} p_g \\ &= (1 - S_g)\frac{\rho_l^h}{\rho_g^{std}} + S_g \frac{1}{\rho_g^{std}} \frac{M^h}{R\theta} \frac{\rho_l^h}{HM^h} = \left(1 + \left(\frac{1}{HR\theta} - 1\right) S_g\right) \frac{\rho_l^h}{\rho_g^{std}} \\ &= (1 + (\omega - 1)S_g) R_s \end{aligned}$$

En considérant cette fois le couple (p_l, X), on peut suivre une démarche analogue à celle qui a mené à la construction du système (5.5)-(5.6) avec le couple (p_l, R_s) et obtenir un autre système qui est lui aussi valable à la fois dans le cas saturé et dans le cas insaturé.

Pour comprendre pourquoi on retient le couple (p_l, R_s) plutôt que le couple (p_l, X) pour le choix des variables principales, il faut s'intéresser au comportement des différentes grandeurs physiques à l'interface d'une hétérogénéité. De manière générale, l'équilibre mécanique du milieu poreux garantie la continuité de la pression de chaque phase tandis que le mécanisme de diffusion conduit à la continuité de la concentration d'un composant dans une phase. Ainsi, les grandeurs p_l, p_g et ρ_l^h (autrement dit R_s) sont continues et ceci même à travers l'interface séparant deux milieux poreux de caractéristiques différentes. Il n'en va pas de même pour les saturations. Dans un milieu poreux homogène la loi de pression capillaire ne dépend pas de l'espace, donc, du fait de la continuité de p_l et de R_s, la saturation de gaz (voir relation (5.3)) est continue. Par contre, à l'interface d'une hétérogénéité, la loi de pression capillaire n'est pas la même de part et d'autre de l'interface (milieux poreux différents) et la saturation de gaz, S_g, n'est plus nécessairement continue. Etant donnée la définition de la concentration totale d'hydrogène ($X = (1+(\omega-1)S_g)R_s$), on constate que la variable X peut elle aussi être discontinue.

Au niveau de la résolution numérique, travailler avec des inconnues susceptibles d'être discontinues est assez contraignant sur le choix des méthodes envisageables. La méthode classique des éléments finis ne peut utilisée directement. Pour pouvoir l'utiliser dans une configuration hétérogène sur le modèle en (p_l, X) proposé dans [BJS09], il faudrait par exemple enrichir la méthode en imposant le saut de discontinuité aux interfaces (qui dépend de la valeur des inconnues) par une méthode de contrainte ; ou bien utiliser des techniques de décomposition de domaines de sorte que chaque domaine soit composé d'un seul type de milieu poreux et réintroduire le saut de discontinuité aux interfaces dans les échanges d'informations entre les domaines. Notons néanmoins que d'autres méthodes de discrétisation plus élaborées comme les méthode de Galerkin discontinues sont en mesure de traiter globalement les discontinuités des inconnues.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

5.3 Adimensionnement et simplifications possibles du modèle

5.3.1 Adimensionnement du modèle

On se propose ici de réécrire le système (5.5)-(5.6) sous forme adimensionnée de manière à réduire le nombre de paramètres du modèle et simplifier la comparaison entre les différents termes des équations.

Pour cela, on introduit les constantes suivantes : la pression caractéristique p_0, la longueur caractéristique L_0, le temps caractéristique t_0, la perméabilité caractéristique k_0 et la porosité caractéristique Φ_0. Notons g l'intensité de l'accélération de la pesanteur et $\mathbf{e}$ son vecteur directeur unitaire, de sorte que $\mathbf{g} = g\mathbf{e}$. On définit $\tilde{p}$, $\tilde{r}$, $\tilde{t}$, $\tilde{\Phi}$ et $\tilde{\mathbb{K}}$, respectivement la pression liquide, la concentration d'hydrogène dissout, le temps, la porosité et le tenseur de perméabilité absolue adimensionnés qui sont donnés par :

$$\tilde{p} \equiv \frac{p_l}{p_0} \quad ; \quad \tilde{r} \equiv \frac{R_s}{C_h p_0} \quad ; \quad \tilde{t} \equiv \frac{t}{t_0} \quad ; \quad \tilde{\Phi} \equiv \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad ; \quad \tilde{\mathbb{K}} \equiv \frac{1}{k_0}\mathbb{K} \tag{5.14}$$

et les opérateurs de divergence, $\tilde{\text{div}}$, et de gradient, $\tilde{\nabla}$, dans la variable d'espace adimensionnée qui sont donnés par :

$$\tilde{\text{div}} \equiv L_0 \text{div} \quad \text{et} \quad \tilde{\nabla} \equiv L_0 \nabla \tag{5.15}$$

A partir de la définition (5.3), on peut exprimer la saturation S_g en fonction des variables adimensionnées $\tilde{p}$ et $\tilde{r}$ en introduisant l'application

$$\tilde{f} : u \to f(p_0 u) \tag{5.16}$$

de sorte que $S_g = \tilde{f}(\tilde{r} - \tilde{p})$.

On peut alors réécrire le système (5.5)-(5.6) sous la forme adimensionnée suivante :

$$-\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}\left(\tilde{\Phi}\tilde{f}(\tilde{r}-\tilde{p})\right) - \gamma_1 \tilde{\text{div}}(\tilde{A}_{1,1}\tilde{\nabla}\tilde{p} - \alpha_1\alpha_3\tilde{A}^{(2)}_{2,2}\tilde{\nabla}\tilde{r} + \beta_2\tilde{B}_1) = \alpha_1\gamma_2\frac{\mathcal{F}^w}{\mathcal{F}_0} \tag{5.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\Phi}a \circ \tilde{f}(\tilde{r}-\tilde{p})\tilde{r}) - \gamma_1 \tilde{\text{div}}(\tilde{A}_{2,1}\tilde{\nabla}\tilde{p} + \left(\beta_1\tilde{A}^{(1)}_{2,2} + \alpha_3\tilde{A}^{(2)}_{2,2}\right)\tilde{\nabla}\tilde{r} + \beta_2\tilde{B}_2) = \gamma_2\frac{\mathcal{F}^h}{\mathcal{F}_0} \tag{5.18}$$

avec

$$\tilde{A}_{1,1} = \tilde{\mathbb{K}}k_{r,l} \quad ; \quad \tilde{A}_{2,1} = \tilde{\mathbb{K}}k_{r,l}\tilde{r} \quad ; \quad \tilde{A}^{(1)}_{2,2} = \tilde{\mathbb{K}}k_{r,g}\tilde{r} \quad ; \quad \tilde{A}^{(2)}_{2,2} = \frac{\tilde{\Phi}(1-S_g)}{1+\alpha_2\tilde{r}} \quad ;$$
$$\tilde{B}_1 = -\tilde{\mathbb{K}}k_{r,l}(1+\alpha_1\tilde{r})\mathbf{e} \quad ; \quad \tilde{B}_2 = -\tilde{\mathbb{K}}k_{r,l}\tilde{r}(1+\alpha_1\tilde{r})\mathbf{e} - \omega\alpha_1\beta_1\tilde{\mathbb{K}}k_{r,g}\tilde{r}^2\mathbf{e} \tag{5.19}$$

et les coefficients sans dimension suivants :

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \frac{C_h p_0}{G} & \alpha_2 &= \frac{C_h p_0}{F} & \alpha_3 &= \frac{\Phi_0 D_l^h \mu_l}{p_0 k_0} \\
\beta_1 &= \frac{\mu_l C_v}{\mu_g C_h} & \beta_2 &= \frac{L_0 \rho_l^{std} g}{p_0} & & \\
\gamma_1 &= \frac{t_0 p_0 k_0}{\Phi_0 L_0^2 \mu_l} & \gamma_2 &= \frac{1}{C_h p_0 \Phi_0} & &
\end{aligned} \tag{5.20}$$

Le système (5.17)-(5.18) fait de plus intervenir la constante $\mathcal{F}_0 = \frac{\rho_g^{std}}{t_0}$, de la dimension d'une source volumique massique.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

5.3.2 Simplification du modèle dans le cas d'un stockage

A partir du système adimensionné (5.17)-(5.18), il est possible de comparer les différents termes pour éventuellement en négliger certains. On peut distinguer trois catégories parmi les paramètres apparaissant dans les coefficients sans dimension définis en (5.20) : les paramètres propres au mélange fluide, *i.e.* relatifs aux phases et aux composants (F, G, C_h, C_v, D_l^h, μ_l, μ_g et ρ_l^{std}) ; les paramètres propres au milieu poreux (k_0 et Φ_0) ; et les paramètres spécifiques à la configuration du problème (p_0, t_0 et L_0). On s'intéresse aux valeurs que prennent les coefficient sans dimensions pour un écoulement eau/hydrogène dans une configuration de stockage géologique telle qu'elle est décrite dans l'exercice Couplex-Gaz (voir [AND] et chapitre 8).

Solution liquide très diluée

Tout d'abord, on peut simplifier les termes $(1 + \alpha_1\tilde{r})$ et $(1 + \alpha_2\tilde{r})$ apparaissant dans les expressions de $\tilde{A}_{2,2}^{(2)}$, $\tilde{B}_1$ et $\tilde{B}_2$. En effet, pour les composants eau et hydrogène, on peut calculer que

$$\alpha_1 = \frac{p_0}{6.5\ 10^{10}\ Pa} \quad \text{et} \quad \alpha_2 = \frac{p_0}{1.3\ 10^{10}\ Pa}$$

tandis que les pressions sont de l'ordre de 1 Mpa, *i.e.* $p_0 = 10^6\ Pa$. On considérera donc que $\alpha_1\tilde{r} \ll 1$ et $\alpha_2\tilde{r} \ll 1$. Notons que cette approximation correspond à l'hypothèse d'une solution très diluée (voir section 4.2.6) : $X_l^h = \alpha_2\tilde{r}/(1 + \alpha_2\tilde{r}) \ll 1$.

Equation en pression

Il est aussi possible de simplifier l'équation (5.17) en comparant les termes $\left(\tilde{A}_{1,1}\tilde{\nabla}\tilde{p}\right)$ et $\left(\alpha_1\alpha_3\tilde{A}_{2,2}^{(2)}\tilde{\nabla}\tilde{r}\right)$. En séparant les paramètres relatifs au mélange fluide de ceux relatifs au milieu poreux, on a dans le cas eau/hydrogène :

$$\alpha_1\alpha_3 = \left(\frac{C_h D_l^h \mu_l}{G}\right)\left(\frac{\Phi_0}{k_0}\right) = \frac{4.6\ 10^{-23}\ m^2}{k_0/\Phi_0}$$

Or, dans l'exercice Couplex-Gaz, le rapport k_0/Φ_0 varie de $3\ 10^{-20}\ m^2$ pour le COX (roche hôte) à $4\ 10^{-15}\ m^2$ pour le colis et atteint $10^{-12}\ m^2$ pour le jeu (qui est ici modélisé par un milieu poreux très perméable). On a ainsi $\alpha_1\alpha_3 \leq 1.4\ 10^{-3}$ quelque soit le matériau considéré. On pourra donc négliger le terme $\left(\alpha_1\alpha_3\tilde{A}_{2,2}^{(2)}\tilde{\nabla}\tilde{r}\right)$ devant le terme $\left(\tilde{A}_{1,1}\tilde{\nabla}\tilde{p}\right)$, l'équation (5.17) devenant alors

$$-\frac{\partial}{\partial\tilde{t}}\left(\tilde{\Phi}\tilde{f}(\tilde{r}-\tilde{p})\right) - \gamma_1\tilde{\mathrm{div}}(\tilde{A}_{1,1}\tilde{\nabla}\tilde{p} + \beta_2\tilde{B}_1) = \alpha_1\gamma_2\frac{\mathcal{F}^w}{\mathcal{F}_0}$$

Physiquement, ceci revient à négliger le flux d'eau liquide dû à la diffusion de l'hydrogène dissout dans l'eau. Notons que c'est ce qui est régulièrement fait quand on étudie la diffusion d'un composé dissout en milieux poreux saturés.

Equation en concentration

L'analyse de l'équation (5.18) est plus délicate, il s'agit d'évaluer le poids des trois termes de l'expression

$$\tilde{A}_{2,1}\tilde{\nabla}\tilde{p} + \left(\beta_1\tilde{A}_{2,2}^{(1)} + \alpha_3\tilde{A}_{2,2}^{(2)}\right)\tilde{\nabla}\tilde{r}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Comparons dans un premier temps les deux termes $\beta_1 \tilde{A}^{(1)}_{2,2}$ et $\alpha_3 \tilde{A}^{(2)}_{2,2}$. En séparant les paramètres par catégorie, on a pour le cas eau/hydrogène

$$\frac{\beta_1}{\alpha_3} = p_0 \left(\frac{k_0}{\Phi_0}\right)\left(\frac{C_v}{C_h D_l^h \mu_g}\right) = \frac{p_0(k_0/\Phi_0)}{6\ 10^{-16}\ Pa.m^2}$$

Pour les valeurs de p_0 et de k_0/Φ_0 mentionnées au dessus, on obtient $\beta_1/\alpha_3 \geq 50$ quelque soit le matériau considéré. Ceci incite à négliger $\alpha_3 \tilde{A}^{(2)}_{2,2}$ devant $\beta_1 \tilde{A}^{(1)}_{2,2}$. Cependant, $\tilde{A}^{(1)}_{2,2} = \tilde{\mathbb{K}} k_{r,g} \tilde{r}$ s'annule en l'absence de phase gazeuse : $k_{r,g}(S_g = 0) = 0$. Il n'est donc pas possible de simplifier le terme $\left(\beta_1 \tilde{A}^{(1)}_{2,2} + \alpha_3 \tilde{A}^{(2)}_{2,2}\right)$.

Si l'on considère directement les coefficients β_1 et α_3, on a pour le cas eau/hydrogène

$$\beta_1 = \frac{\mu_l C_v}{\mu_g C_h} = 5\ 10^3 \quad \text{et} \quad \alpha_3 = \left(D_l^h \mu_l\right)\left(\frac{\Phi_0}{k_0}\right) p_0 = \frac{3\ 10^{-12}\ Pa.m^2}{p_0(k_0/\Phi_0)}$$

Pour les valeurs de p_0 et de k_0/Φ_0 mentionnées au dessus, on constate que la valeur de α_3 varie de $3\ 10^{-6}$ à 10^2 selon le matériau considéré. Compte tenu de la remarque précédente sur la disparition du gaz, aucun des trois termes ne peut donc être négligé.

Analyse du terme $\tilde{B}_2$

Compte tenu de la simplification de $(1 + \alpha_1 \tilde{r})$ exposée plus haut, on peut écrire

$$\tilde{B}_2 = -\left(k_{r,l}\tilde{r} + \omega \alpha_1 \beta_1 k_{r,g} \tilde{r}^2\right) \tilde{\mathbb{K}} \mathbf{e}$$

Puisque le terme $k_{r,g}$ peut s'annuler, $\tilde{B}_2$ peut être simplifié uniquement si $\omega \alpha_1 \beta_1 \ll 1$. Pour le cas eau/hydrogène, on a

$$\omega \alpha_1 \beta_1 = \left(\frac{\mu_l C_v^2}{G \mu_g C_h}\right) p_0 = \frac{p_0}{2.6\ 10^5\ Pa}$$

et ainsi $\omega \alpha_1 \beta_1 \approx 4$ pour $p_0 = 10^6\ Pa$. Il n'y donc pas de simplifications pour le terme $\tilde{B}_2$.

Le modèle adimensionné après simplification

Finalement, après élimination des termes négligeables, on obtient le modèle adimensionné et simplifié suivant :

$$-\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}\left(\tilde{\Phi} \tilde{f}(\tilde{r} - \tilde{p})\right) - \gamma_1 \tilde{\mathrm{div}}(\tilde{A}_{1,1} \tilde{\nabla} \tilde{p} + \beta_2 \tilde{B}_1) = \alpha_1 \gamma_2 \frac{\mathcal{F}^w}{\mathcal{F}_0} \tag{5.21}$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\Phi} a \circ \tilde{f}(\tilde{r} - \tilde{p})\tilde{r}) - \gamma_1 \tilde{\mathrm{div}}(\tilde{A}_{2,1} \tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{A}_{2,2} \tilde{\nabla} \tilde{r} + \beta_2 \tilde{B}_2) = \gamma_2 \frac{\mathcal{F}^h}{\mathcal{F}_0} \tag{5.22}$$

avec

$$\tilde{A}_{1,1} = \tilde{\mathbb{K}} k_{r,l} \ ; \ \tilde{A}_{2,1} = \tilde{\mathbb{K}} k_{r,l} \tilde{r} \ ; \ \tilde{A}_{2,2} = \beta_1 \tilde{\mathbb{K}} k_{r,g} \tilde{r} + \alpha_3 \tilde{\Phi}(1 - S_g) \ ;$$
$$\tilde{B}_1 = -\tilde{\mathbb{K}} k_{r,l} \mathbf{e} \ ; \ \tilde{B}_2 = -\tilde{\mathbb{K}} k_{r,l} \tilde{r} \mathbf{e} - \omega \alpha_1 \beta_1 \tilde{\mathbb{K}} k_{r,g} \tilde{r}^2 \mathbf{e} \tag{5.23}$$

et où les différents coefficients sont donnés en (5.20).

C'est sur ce modèle simplifié que l'on étudiera l'existence de solution (voir le chapitre 6) et que l'on procèdera à l'homogénéisation périodique (voir le chapitre 9). Pour plus de généralité, l'implémentation numérique (voir le chapitre 7) sera menée avec le modèle complet (système (5.17)-(5.18)).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 6

Étude de l'existence de solutions

Motivé par les problématiques issues de l'exploitation des réserves pétrolières, le problème des écoulements multiphasiques *incompressibles* et immiscibles en milieux poreux a fait l'objet de nombreuses études depuis les années 1980. La question de l'existence de solution pour ce type d'écoulements est ainsi bien connue et circonscrite (voir par exemple les ouvrages [AKM90], [CJ86] et [GMT96] et les articles [AD85] et [Che01]). Cependant, les techniques développées pour les cas incompressibles ne s'appliquent pas aux cas compressibles tels que les écoulements liquide/gaz apparaissant dans le domaine du stockage géologique de déchets radioactifs. Peu d'études de l'existence de solution existent dans le cas compressible. On peut néanmoins citer une étude du cas compressible, mais sans échanges de matière entre les phases, menée dans [GS08] par C. Galusinski et M. Saad. Pour le cas compressible et avec échanges entre les phases, qui correspond à la situation eau/hydrogène, il existe le travail de A. Mikelic, [Mik09], qui établit l'existence d'une solution sous la condition de petites données pour la concentration d'hydrogène.

On s'intéresse dans ce chapitre à l'étude de l'existence de solutions faibles pour un modèle liquide/gaz avec échange entre les phases et disparition de la phase gazeuse. La stratégie explorée ici consiste en une réécriture du système (5.21)-(5.22) à l'aide d'un changement de variables adéquat de manière à faire entrer le nouveau modèle ainsi obtenu dans le cadre du théorème d'existence d'Alt-Luckhaus (voir [AL83]). On obtient ainsi un résultat d'existence pour le nouveau modèle pour des solutions qui restent arbitrairement bornées. L'étude des estimations *a priori* nécessaires pour clore définitivement la question de l'existence de solutions n'a cependant pas été faite dans ce travail.

6.1 Rappels sur le théorème d'existence d'Alt-Luckhaus

H. Alt et S. Luckhaus ont établi dans [AL83] un théorème d'existence pour les systèmes d'équations différentielles quasilinéaires elliptique-parabolique de la forme :

$$\frac{\partial b^j(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(a^j(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla \mathbf{u})\right) = f^j(\mathbf{b}(\mathbf{u})) \quad \text{sur }]0;T[\times\mathcal{D}\ , j \in [\![1,m]\!] \tag{6.1}$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{u}) = \mathbf{b}^0 \quad \text{sur } \{0\}\times\mathcal{D} \tag{6.2}$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^D \quad \text{sur }]0;T[\times\Gamma_D \tag{6.3}$$

$$a^j(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla \mathbf{u})\cdot\nu = 0 \quad \text{sur }]0;T[\times\left(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_D\right)\ , j \in [\![1,m]\!] \tag{6.4}$$

Ici, m est la taille du système, $\mathcal{D}\subset\mathbb{R}^d$ le domaine, $\Gamma_{\mathcal{D}}\subset\partial\mathcal{D}$ une partie de la frontière et $T>0$ le temps final. $\mathbf{u}=(u^j)_{j=1,\cdots,m}$ désigne le vecteur des m inconnues du problème et l'on note $\nabla\mathbf{u}=(\nabla u^j)_{j=1,\cdots,m}$ le gradient en espace des inconnues ; $\mathbf{b}(\mathbf{u})=(b^j(\mathbf{u}))_{j=1,\cdots,m}$

et $\mathbf{f}(\mathbf{b}(\mathbf{u})) = (f^j(\mathbf{b}(\mathbf{u})))_{j=1,\cdots,m}$ sont des applications de $\mathbb{R}^m$ dans $\mathbb{R}^m$. Les $a^j(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u})$ sont à valeurs dans $\mathbb{R}^d$ et l'on notera $\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u}) = (a^j(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u}))_{j=1,\cdots,m}$.

On rappelle dans ce qui suit les hypothèses et l'énoncé du théorème de Alt-Luckhaus, comme énoncés dans [AL83].

6.1.1 Hypothèses sur les données

Les hypothèses sur les données sont les suivantes :

1) $\mathcal{D}$ est un ouvert borné et connexe de $\mathbb{R}^d$ à frontière lipschitzienne, $\Gamma_{\mathcal{D}} \subset \partial\mathcal{D}$ est de mesure non nulle et $0 < T < \infty$.

2) $\mathbf{b}$, est un champ vectoriel monotone dérivant d'un potentiel, c'est-à-dire qu'il existe une fonction convexe C^1 $\psi : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ telle que $\mathbf{b} = \nabla_{\mathbf{u}}\psi$. Sans perte de généralité, on peut toujours supposer que $\mathbf{b}(0) = 0$.

3) $\mathbf{a}(\mathbf{z}, \mathbf{p})$ est continue en $\mathbf{z}$ et en $\mathbf{p}$ et est elliptique au sens où il existe $1 < q < \infty$ et $c_1 > 0$ tels que, quelques soient $\mathbf{z}$, $\mathbf{p}_1$ et $\mathbf{p}_2$, on ait

$$(\mathbf{a}(\mathbf{z}, \mathbf{p}_1) - \mathbf{a}(\mathbf{z}, \mathbf{p}_2)) \cdot (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \geq c_1 |\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|^q$$

4) Il existe $c_2 > 0$ tel que la condition, dite "de croissance", suivante est vérifiée pour tout $\mathbf{z}$ et $\mathbf{p}$

$$|\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{z}), \mathbf{p})| + |\mathbf{f}(\mathbf{b}(\mathbf{z}))| \leq c_2 \left(1 + B(\mathbf{z})^{(q-1)/q} + |\mathbf{p}|^{q-1}\right) \tag{6.5}$$

où B est une application de $\mathbb{R}^d$ dans $\mathbb{R}$ définie par

$$B(\mathbf{z}) \equiv \mathbf{b}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{z} - \psi(\mathbf{z}) + \psi(0) \tag{6.6}$$

On peut vérifier que $B(\mathbf{z}) \geq 0$ pour tout $\mathbf{z}$ (voir [AL83]).

6.1.2 Hypothèses sur les conditions initiales et aux limites

Les hypothèses sur les conditions initiales et sur les conditions aux limites du problème sont les suivantes :

1) $\mathbf{u}^D$ est dans $L^q(0, T; W^{1,q}(\mathcal{D}))$ et dans $L^\infty(]0, T[\times\mathcal{D})$.

2) Il existe une fonction $\mathbf{u}^0$ mesurable telle que $\mathbf{b}^0 = \mathbf{b}(\mathbf{u}^0)$ et que $B(\mathbf{u}^0) \in L^1(\mathcal{D})$.

6.1.3 Rappels sur la définition d'une solution faible

Avec les hypothèses de la section 6.1.2 vérifiées, on peut introduire $q^* = \frac{q}{q-1}$ et définir les espaces fonctionnels suivants :

$$V \equiv \left\{\mathbf{v} \in W^{1,q}(\mathcal{D}) | \mathbf{v} = 0 \text{ sur } \Gamma_D\right\} \text{ et } V^* \text{ son dual}$$

Alors $\mathbf{u} \in \mathbf{u}^D + L^q(0, T; V)$ sera appelée *solution faible* du problème (6.1)-(6.4) si les deux propriétés suivantes sont satisfaites :

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

1) $\mathbf{b}(\mathbf{u}) \in L^\infty(0,T;L^1(\mathcal{D}))$ et $\partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}) \in L^{q^*}(0,T;V^*)$ avec $\mathbf{b}^0$ pour conditions initiales, c'est-à-dire que

$$\int_0^T \langle \partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}), \zeta \rangle + \int_0^T \int_{\mathcal{D}} (\mathbf{b}(\mathbf{u}) - \mathbf{b}^0) \partial_t \zeta = 0$$

pour toute fonction test $\zeta \in L^q(0,T;V) \cap W^{1,1}(0,T;L^\infty(\mathcal{D}))$ avec $\zeta(T) = 0$.

2) $\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla \mathbf{u})$ et $\mathbf{f}(\mathbf{b}(\mathbf{u}))$ sont dans $L^{q^*}(]0,T[\times\mathcal{D})$ et $\mathbf{u}$ vérifie

$$\int_0^T \langle \partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}), \zeta \rangle + \int_0^T \int_{\mathcal{D}} \mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla \mathbf{u}) \cdot \nabla \zeta = \int_0^T \int_{\mathcal{D}} \mathbf{f}(\mathbf{b}(\mathbf{u})) \zeta$$

pour tout $\zeta \in L^q(0,T;V)$.

6.1.4 Énoncé du théorème

Théorème 5 (Alt-Luckhaus)**.** *En supposant que les hypothèses des sections 6.1.1 et 6.1.2 soient satisfaites et que de plus $\partial_t \mathbf{u}^D \in L^1(0,T;L^\infty(\mathcal{D}))$, alors il existe une solution faible au problème* (6.1)-(6.4) *au sens défini en section 6.1.3.*

6.2 Première tentative d'application du théorème

On peut distinguer deux types d'hypothèses dans le théorème 5 : d'une part celles relatives à la régularité des conditions initiales et des conditions aux limites (voir section 6.1.2) et d'autre part celles relatives aux "données" du modèle (voir section 6.1.1). Dans ce chapitre, on s'intéressera uniquement à l'existence de solutions pour des conditions au bord régulières. L'application du théorème de Alt-Luckhaus pour un modèle donné se réduit donc à la vérification des hypothèses sur les données.

Considérons tout d'abord le modèle complet donné par le système (5.17)-(5.18), ou sa version simplifiée donnée par le système (5.21)-(5.22). Ces deux modèles sont exprimés avec la pression liquide, $\tilde{p}$, et la concentration d'hydrogène dissout, $\tilde{r}$, comme variables principales. En réécrivant l'un ou l'autre de ces modèles (complet ou simplifié) dans le formalisme du théorème de Alt-Luckhaus, c'est-à-dire conformément aux notations du système (6.1)-(6.4), on obtient la même expression de $\mathbf{u}$ et $\mathbf{b}(\mathbf{u})$ pour les deux modèles :

$$\mathbf{u} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{p} \\ \tilde{r} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{b}(\mathbf{u}) \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\Phi} \tilde{f}(u_2 - u_1) \\ \tilde{\Phi} a(\tilde{f}(u_2 - u_1)) u_2 \end{pmatrix}$$

où les fonctions a et $\tilde{f}$ sont données respectivement par les équations (5.13) et (5.16).

Le premier point à vérifier pour appliquer le théorème est que le "terme conservatif", $\mathbf{b}(\mathbf{u})$, dérive d'un potentiel (voir le point **2)** de la section 6.1.1). Une condition nécessaire pour cela est que $\mathbf{b}(\mathbf{u})$ vérifie la relation

$$\frac{\partial b_1}{\partial u_2} = \frac{\partial b_2}{\partial u_1}$$

Or, compte tenu du fait que $a' = \omega$, on calcule que

$$\frac{\partial b_1}{\partial u_2} = \tilde{\Phi} \tilde{f}'(u_2 - u_1) \quad \text{et} \quad \frac{\partial b_2}{\partial u_1} = \tilde{\Phi} \tilde{f}'(u_2 - u_1) \omega u_2$$

On voit donc ainsi que le terme conservatif ne dérive pas d'un potentiel.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Le même constat peut être fait sur la formulation proposée dans [BJS09] où les variables principales sont (p_l, X), la pression liquide et la concentration totale d'hydrogène.

En conclusion, il n'est donc pas possible d'appliquer le théorème 5 directement sur un modèle formulé en pression-concentration, que ce soit $(\tilde{p}, \tilde{r})$ ou (p_l, X).

Dans le suite, on cherchera donc à réécrire le modèle simplifié (5.21)-(5.22) dans un nouveau jeu de variables principales permettant de satisfaire les hypothèses du théorème et donc de l'appliquer.

Remarque 1. *Notons que l'existence d'un potentiel pour le terme conservatif n'est pas le seul obstacle à l'application du théorème 5 à un modèle d'écoulement eau/hydrogène en milieux poreux. En effet, quitte à abandonner la capacité du modèle à traiter la disparition du gaz, le choix d'une formulation en saturation-concentration totale élimine la question du potentiel puisque dans ce cas :*

$$\mathbf{u} \equiv \begin{pmatrix} S_l \\ X \end{pmatrix} \quad et \quad \mathbf{b}(\mathbf{u}) \equiv \mathbf{u}$$

C'est ce qui est fait dans le travail réalisé par A. Mikelic, [Mik09], où il apparait que l'ellipticité de l'opérateur $\mathbf{a}$ *(voir le point **3)** de la section 6.1.1) n'est garantie que sous la condition de petites données pour la concentration d'hydrogène. Le calcul des valeurs maximales de la concentration d'hydrogène garantissant l'ellipticité montre par ailleurs que cette borne maximum dépend des caractéristiques du milieu poreux et, en particulier, qu'elle est d'autant plus faible que le milieu est perméable.*

6.3 Construction d'un changement de variables

On considère le modèle adimensionné et simplifié décrit par le système (5.21)-(5.22). Par souci de simplicité, on suppose de plus que le milieu poreux est homogène et isotrope de sorte que la porosité Φ est une constante et que le tenseur de perméabilité $\mathbb{K}$ peut être assimilé à un scalaire k constant ; des généralisations du théorème 5 permettent de traiter le cas d'un milieu hétérogène (voir la section 1.10 de [AL83]). Notons que sous cette hypothèse, la porosité adimensionnée et le tenseur de perméabilité adimensionné peuvent être considérés égaux, respectivement, à l'unité et à l'identité : $\tilde{\Phi} = 1$ et $\tilde{\mathbb{K}} = \mathbb{I}_d$.

Pour alléger l'écriture, on utilisera dans la suite les notations p et r au lieu de $\tilde{p}$ et $\tilde{r}$ pour la pression liquide adimensionnée et pour la concentration d'hydrogène dissout adimensionnée telles que définies en (5.14).

Le système peut finalement s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\tilde{\mathcal{A}}\begin{pmatrix} \nabla p \\ \nabla r \end{pmatrix} - \tilde{\mathcal{B}}\right) = \tilde{\mathcal{F}} \tag{6.7}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

où, en gardant les notations introduites en (5.23), on définit

$$\mathbf{h}(p,r) \equiv \begin{pmatrix} -\tilde{f}(r-p) \\ a(\tilde{f}(r-p))r \end{pmatrix} \; ; \tag{6.8}$$

$$\tilde{\mathcal{A}}(\mathbf{h}) \equiv \gamma_1 \begin{pmatrix} k_{r,l}(-h_1) & 0 \\ k_{r,l}(-h_1)\frac{h_2}{a(-h_1)} & \beta_1 k_{r,g}(-h_1)\frac{h_2}{a(-h_1)} + \alpha_3(1+h_1) \end{pmatrix} \; ; \tag{6.9}$$

$$\tilde{\mathcal{B}}(\mathbf{h}) \equiv \beta_2 \begin{pmatrix} k_{r,l}(-h_1) \\ k_{r,l}(-h_1)\frac{h_2}{a(-h_1)} + \omega\alpha_1\beta_1 k_{r,g}(-h_1)\left(\frac{h_2}{a(-h_1)}\right)^2 \end{pmatrix} \mathbf{e} \tag{6.10}$$

$$\text{et} \quad \tilde{\mathcal{F}} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{F}}_1 \\ \tilde{\mathcal{F}}_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1\gamma_2\frac{\mathcal{F}^w}{\mathcal{F}_0} \\ \gamma_2\frac{\mathcal{F}^h}{\mathcal{F}_0} \end{pmatrix} \tag{6.11}$$

6.3.1 Introduction de nouvelles variables principales

Introduisons maintenant le nouveau jeu de variables $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ à déterminer. On suppose que p et r sont des fonctions univoques de $\mathbf{u}$: $p = p(\mathbf{u})$ et $r = r(\mathbf{u})$ et on note $J(\mathbf{u})$ la jacobienne de (p,r) par rapport à $\mathbf{u}$:

$$J \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial u_1} & \frac{\partial p}{\partial u_2} \\ \frac{\partial r}{\partial u_1} & \frac{\partial r}{\partial u_2} \end{pmatrix}$$

Le nouveau modèle consiste à réécrire le système (6.7) dans la nouvelle variable $\mathbf{u}$. On obtient ainsi le système suivant :

$$\frac{\partial \mathbf{b}(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\bar{\mathcal{A}}\nabla\mathbf{u} - \tilde{\mathcal{B}}\right) = \tilde{\mathcal{F}} \tag{6.12}$$

où l'on définit

$$\mathbf{b}(\mathbf{u}) \equiv \mathbf{h}(p(\mathbf{u}), r(\mathbf{u})) - \mathbf{h}(p(0), r(0)) \quad \text{et} \quad \bar{\mathcal{A}} \equiv \tilde{\mathcal{A}}J \tag{6.13}$$

En introduisant $\mathbf{a}(\mathbf{u}, \nabla\mathbf{u}) \equiv \bar{\mathcal{A}}\nabla\mathbf{u} - \tilde{\mathcal{B}}$, l'équation (6.12) devient

$$\frac{\partial \mathbf{b}(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\mathbf{a}(\mathbf{u}, \nabla\mathbf{u})\right) = \tilde{\mathcal{F}}$$

qui est analogue au système (6.1) à la différence que $\mathbf{a}(\cdot, \nabla\mathbf{u})$ dépend *a priori* de $\mathbf{u}$ au lieu de $\mathbf{b}(\mathbf{u})$. On verra dans la suite qu'il est possible de revenir exactement dans la forme des systèmes d'équations différentielles traités par le théorème 5.

Il s'agit désormais de déterminer le choix de la variable $\mathbf{u}$ qui permet au système (6.12) de satisfaire les hypothèses énoncées en section 6.1.1. Pour cela, nous allons étudier les propriétés, nécessaires ou suffisantes, que doit vérifier la variable $\mathbf{u}$ pour que :

- le terme conservatif, $\mathbf{b}(\mathbf{u})$, dérive d'un potentiel convexe ;
- l'opérateur $\mathbf{a}$ soit elliptique ;
- la "condition de croissance" (6.5) soit satisfaite.

6.3.2 Existence d'un potentiel convexe

Une condition nécessaire pour qu'il existe une fonction $\psi(\mathbf{u})$ telle que $\mathbf{b}(\mathbf{u}) = \nabla_{\mathbf{u}}\psi$ est que pour tout $\mathbf{u}$

$$\frac{\partial b_1}{\partial u_2}(\mathbf{u}) = \frac{\partial b_2}{\partial u_1}(\mathbf{u}) \tag{6.14}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Or on a

$$\frac{\partial b_1}{\partial u_2} = -\tilde{f}'(r-p)\left(\frac{\partial r}{\partial u_2} - \frac{\partial p}{\partial u_2}\right)$$

et

$$\frac{\partial b_2}{\partial u_1} = (\omega-1)\tilde{f}'(r-p)\left(\frac{\partial r}{\partial u_1} - \frac{\partial p}{\partial u_1}\right) r + \Big(1 + (\omega-1)\tilde{f}(r-p)\Big)\frac{\partial r}{\partial u_1}$$

Compte tenu du fait que $\tilde{f}$ et $\tilde{f}'$ sont nulles sur $\mathbb{R}^*_-$, on distingue deux cas selon que $(r-p)$ est positif ou négatif.

Pour $r < p$, la condition (6.14) se réduit simplement à $\frac{\partial r}{\partial u_1} = 0$. Cette condition, nécessaire pour $\mathbf{u} \in \{\mathbf{u}; r(\mathbf{u}) - p(\mathbf{u}) < 0\}$, est particulièrement remarquable et "structurante" pour le choix de la variable $\mathbf{u}$. On se propose donc de l'étendre pour tout $\mathbf{u}$ et l'on formule l'hypothèse supplémentaire suivante :

H8. *Pour tout* $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$, $\dfrac{\partial r}{\partial u_1}(\mathbf{u}) = 0$.

Alors, pour $r > p$ et sous l'hypothèse **H8**, la condition (6.14) devient

$$-\tilde{f}'(r-p)\left(\frac{\partial r}{\partial u_2} - \frac{\partial p}{\partial u_2}\right) = -(\omega-1)\tilde{f}'(r-p)\frac{\partial p}{\partial u_1} r$$

qui est vérifiée si

$$\frac{\partial r}{\partial u_2} - \frac{\partial p}{\partial u_2} = (\omega-1) r \frac{\partial p}{\partial u_1} \tag{6.15}$$

On remarque alors que, moyennant une régularité suffisante de $r(\mathbf{u})$ et de $p(\mathbf{u})$, il suffit que l'hypothèse **H8** et la relation (6.15) soient satisfaites pour qu'il existe $\psi(\mathbf{u})$ telle que $\mathbf{b}(\mathbf{u}) = \nabla_{\mathbf{u}}\psi$.

On souhaite de plus que $\psi(\mathbf{u})$ soit convexe, c'est-à-dire que sa matrice hessienne, $H_\psi = \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial u_i \partial u_j}\right)_{i,j} = \left(\frac{\partial b_i}{\partial u_i}\right)_{i,j}$, soit positive. Comme $H_\psi(\mathbf{u})$ est une matrice symétrique réelle de taille deux, il suffit donc que sa trace et son déterminant soient positifs. Or, sous l'hypothèse **H8** et (6.15), on a les égalités suivantes :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 u_1} = \frac{\partial b_1}{\partial u_1} = \tilde{f}'(r-p)\frac{\partial p}{\partial u_1} \ ;$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 u_2} = \frac{\partial b_2}{\partial u_2} = (\omega-1)^2 r^2 \tilde{f}'(r-p)\frac{\partial p}{\partial u_1} + \Big(1 + (\omega-1)\tilde{f}(r-p)\Big)\frac{\partial r}{\partial u_2} \ ;$$

$$\text{et} \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial u_1 \partial u_2} = \frac{\partial b_1}{\partial u_2} = \frac{\partial b_2}{\partial u_1} = -(\omega-1) r \tilde{f}'(r-p)\frac{\partial p}{\partial u_1}$$

D'où l'on calcule la trace et le déterminant de H_ψ :

$$\mathrm{tr}(H_\psi) = \Big(1 + (\omega-1)^2 r^2\Big)\tilde{f}'(r-p)\frac{\partial p}{\partial u_1} + \Big(1 + (\omega-1)\tilde{f}(r-p)\Big)\frac{\partial r}{\partial u_2}$$

et

$$\det(H_\psi) = \Big(1 + (\omega-1)\tilde{f}(r-p)\Big)\tilde{f}'(r-p)\frac{\partial p}{\partial u_1}\frac{\partial r}{\partial u_2}$$

Etant donné que $\tilde{f}$ et $\tilde{f}'$ sont positifs, il suffit donc que

$$\forall \mathbf{u} \quad \frac{\partial p}{\partial u_1} \geq 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial r}{\partial u_2} \geq 0 \tag{6.16}$$

pour que $\psi(\mathbf{u})$ soit convexe si **H8** et (6.15) sont satisfaits.

On formule donc le lemme suivant :

Lemme 1. *Si* $(p(\mathbf{u}), r(\mathbf{u}))$ *vérifie les relations* (6.15) *et* (6.16) *et l'hypothèse* ***H8****, alors il existe une fonction convexe* $\psi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ *telle que* $\mathbf{b}(\mathbf{u}) = \nabla_{\mathbf{u}}\psi$.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

6.3.3 Ellipticité de l'opérateur

Pour le système (6.12), l'ellipticité de l'opérateur **a** telle que définie en section 6.1.1 se ramène, compte tenu que $\mathbf{a}(\mathbf{u}, \nabla\mathbf{u}) = \bar{\mathcal{A}}\nabla\mathbf{u} - \tilde{\mathcal{B}}$, à satisfaire la condition suivante :

$$\exists c_1 > 0 \ \forall \mathbf{z} \ \forall \mathbf{p} \quad \bar{\mathcal{A}}(\mathbf{z})\mathbf{p}\cdot\mathbf{p} \geq c_1|\mathbf{p}|^2$$

C'est-à-dire que **a** est elliptique si $\bar{\mathcal{A}}(\mathbf{z})$ est *uniformément* elliptique. Ceci est encore équivalent à ce que les valeurs propres (toutes nécessairement réelles) de la matrice symétrisée associée, $\bar{\mathcal{A}}_s = \frac{1}{2}\left(\bar{\mathcal{A}} + \bar{\mathcal{A}}^t\right)$, soient minorées par une constante strictement positive indépendante de $\mathbf{z}$.

On montre alors par une étude simple du polynôme caractéristique de $\bar{\mathcal{A}}_s$, $\Pi(X) = X^2 - \mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}_s)X + \det(\bar{\mathcal{A}}_s)$, que les racines de $\Pi(X)$:

- sont positives si $\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}_s) \geq 0$ et $\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}_s) \geq 0$
- et, qu'alors, elles sont minorées par $\det(\bar{\mathcal{A}}_s)/\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}_s)$.

On peut de plus calculer que

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}_s) &= \mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}) \\ &= \left(\frac{\partial p}{\partial u_1} + r\frac{\partial p}{\partial u_2}\right)\tilde{\mathcal{A}}_{1,1} + \frac{\partial r}{\partial u_2}\tilde{\mathcal{A}}_{2,2}\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\det(\bar{\mathcal{A}}_s) &= \det(\bar{\mathcal{A}}) - \frac{1}{4}\left(\bar{\mathcal{A}}_{1,2} - \bar{\mathcal{A}}_{2,1}\right)^2 \\ &= \frac{\partial p}{\partial u_1}\frac{\partial r}{\partial u_2}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1}\tilde{\mathcal{A}}_{2,2} - \frac{1}{4}\left(\frac{\partial p}{\partial u_2} - r\frac{\partial p}{\partial u_1}\right)^2\tilde{\mathcal{A}}_{1,1}^2\end{aligned}$$

Positivité de la trace et du déterminant

Il n'est pas possible de garantir *a priori* la positivité de $\det(\bar{\mathcal{A}}_s)$. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer le cas particulier du régime saturé, *i.e.* $S_g = 0$. Dans ce cas, on a alors

$$\det(\bar{\mathcal{A}}_s)\big|_{S_g=0} = \gamma_1^2\left[\alpha_3\frac{\partial p}{\partial u_1}\frac{\partial r}{\partial u_2} - \frac{1}{4}\left(\frac{\partial p}{\partial u_2} - r\frac{\partial p}{\partial u_1}\right)^2\right]$$

où l'on rappelle que $\alpha_3 = \frac{\Phi_0 D_l^h \mu_l}{p_0 k_0}$. Toujours *a priori*, le second terme de l'expression de $\det(\bar{\mathcal{A}}_s)$ n'est pas nul et il est donc toujours possible que $\det(\bar{\mathcal{A}}_s) < 0$ si α_3 est suffisamment petit ; or il se trouve justement que α_3 tend vers zéro quand la perméabilité, k_0, tend vers l'infini (cf remarque 1).

Une hypothèse qui permet d'éviter cette limitation est la suivante

H9. *Pour tout* $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$, $\frac{\partial p}{\partial u_2} = r\frac{\partial p}{\partial u_1}$.

La conséquence essentielle de cette hypothèse est de rendre $\bar{\mathcal{A}}(\mathbf{u})$ symétrique pour tout $\mathbf{u}$ ($\bar{\mathcal{A}}_s = \bar{\mathcal{A}}$). En effet, sous **H9**, on a

$$\bar{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial u_1}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1} & r\frac{\partial p}{\partial u_1}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1} \\ r\frac{\partial p}{\partial u_1}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1} & r^2\frac{\partial p}{\partial u_1}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1} + \frac{\partial r}{\partial u_2}\tilde{\mathcal{A}}_{2,2}\end{pmatrix}$$

et sa trace et son déterminant deviennent

$$\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}) = (1+r^2)\frac{\partial p}{\partial u_1}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1} + \frac{\partial r}{\partial u_2}\tilde{\mathcal{A}}_{2,2}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

et

$$\det(\bar{\mathcal{A}}) = \frac{\partial p}{\partial u_1}\frac{\partial r}{\partial u_2}\tilde{\mathcal{A}}_{1,1}\tilde{\mathcal{A}}_{2,2}$$

Compte tenu que $\tilde{\mathcal{A}}_{1,1}$ et $\tilde{\mathcal{A}}_{2,2}$ sont toujours positifs, il suffit donc que la relation (6.16) soit satisfaite pour que la trace et le déterminant soient positifs.

Précisions sur le changement de variable

Une seconde conséquence des deux hypothèses **H9** et **H8** ajoutées à (6.15) est de fixer, aux constantes près, le changement de variable. En effet, sous l'hypothèse **H9**, on tire de la relation (6.15) que

$$\frac{\partial p}{\partial u_1} = \frac{1}{\omega r}\frac{\partial r}{\partial u_2} \quad \text{et} \quad \frac{\partial p}{\partial u_2} = r\frac{\partial p}{\partial u_1}$$

Or selon **H8**, r ne dépend que de u_2 d'où l'on déduit que $\frac{\partial p}{\partial u_1}$ et $\frac{\partial p}{\partial u_2}$ ne dépendent aussi que de u_2. On calcule donc que

$$\frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{\partial p}{\partial u_1}\right) = \frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{\partial p}{\partial u_2}\right) = 0$$

C'est-à-dire que $\frac{\partial p}{\partial u_1}$ ne dépend pas non plus de u_2, autrement dit, $\frac{\partial p}{\partial u_1}$ est un constante. On notera donc par la suite

$$\frac{\partial p}{\partial u_1} = \tau_1 = Cste$$

En considérant **H8**, **H9** et (6.15) satisfaites , la jacobienne, $J(\mathbf{u})$, de (p, r) selon $\mathbf{u}$ est alors donnée par :

$$J(\mathbf{u}) = \tau_1 \begin{pmatrix} 1 & r(\mathbf{u}) \\ 0 & \omega r(\mathbf{u}) \end{pmatrix} \tag{6.17}$$

D'où l'on déduit les expressions de $r(\mathbf{u})$ et $p(\mathbf{u})$:

$$r(\mathbf{u}) = \tau_2 e^{\tau_1 \omega u_2} \tag{6.18}$$

$$p(\mathbf{u}) = \tau_1 u_1 + \frac{\tau_2}{\omega} e^{\tau_1 \omega u_2} + \tau_3 \tag{6.19}$$

où τ_2 et τ_3 sont des constantes indépendantes de $\mathbf{u}$. La relation (6.16) devient alors

$$\tau_1 \geq 0 \quad \text{et} \quad \tau_2 \geq 0 \tag{6.20}$$

Remarquons de plus que d'après la relation (6.17), la jacobienne J peut s'exprimer en fonction de $\mathbf{h}(p, r)$. On définit ainsi $\bar{J}(\mathbf{h})$ par

$$\bar{J}(\mathbf{h}) \equiv \tau_1 \begin{pmatrix} 1 & \frac{h_2}{a(-h_1)} \\ 0 & \omega\frac{h_2}{a(-h_1)} \end{pmatrix} \tag{6.21}$$

qui vérifie $\bar{J}(\mathbf{h}(p(\mathbf{u}), r(\mathbf{u}))) = J(\mathbf{u})$. On peut donc exprimer $\mathbf{a}(\cdot, \nabla\mathbf{u})$ en fonction de $\mathbf{b}(\mathbf{u})$, comme dans le système (6.1), au lieu de $\mathbf{u}$ comme jusqu'à maintenant. Pour simplifier, on désignera encore par $\mathbf{a}$ ce nouvel opérateur qui est désormais défini par

$$\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u}) \equiv \tilde{\mathcal{A}}(\mathbf{b}(\mathbf{u}) + \mathbf{h}_0)\bar{J}(\mathbf{b}(\mathbf{u}) + \mathbf{h}_0)\nabla\mathbf{u} - \tilde{\mathcal{B}}(\mathbf{b}(\mathbf{u}) + \mathbf{h}_0) \tag{6.22}$$

où l'on note $\mathbf{h}_0 = \mathbf{h}(p(0), r(0))$.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Conditions pour l'ellipticité

Pour avoir l'ellipticité de l'opérateur $\mathbf{a}$, il faut encore que $\det(\bar{\mathcal{A}})/\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}})$ soit minoré par une constante positive. Compte tenu de la relation (6.17) et des expressions de $\tilde{\mathcal{A}}_{1,1}$ et $\tilde{\mathcal{A}}_{2,2}$, on a

$$\frac{\det(\bar{\mathcal{A}})}{\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}})} = \frac{\gamma_1\tau_1\omega r k_{r,l}(\beta_1 r k_{r,g} + \alpha_3 S_l)}{(1+r^2)k_{r,l} + \omega r(\beta_1 r k_{r,g} + \alpha_3 S_l)}$$

Il n'est donc pas possible de minorer ce rapport *a priori* ; par exemple, dans le cas d'un régime saturé ($S_g = 0$), on a

$$\left.\frac{\det(\bar{\mathcal{A}})}{\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}})}\right|_{S_g=0} = \gamma_1\tau_1\omega\alpha_3\frac{r}{1+\omega\alpha_3 r + r^2}$$

qui tend vers zéro quand r tend vers zéro ou l'infini. On rajoute donc l'hypothèse suivante :

H10. *Il existe* $r_{min} > 0$, $r_{max} > r_{min}$, $S_{l,min} > 0$ *et* $k_{min} > 0$ *tels que*

$$\begin{aligned} r_{min} \le r(\mathbf{u}) \le r_{max}\ , \\ \tilde{f}(r(\mathbf{u}) - p(\mathbf{u})) \le (1 - S_{l,min}) \\ et \quad k_{r,l} \circ \tilde{f}(r(\mathbf{u}) - p(\mathbf{u})) \ge k_{min} \end{aligned}$$

Alors, sous la condition **H10** et sachant que $k_{r,l}$, $k_{r,g}$ et S_l sont tous trois inférieurs à 1, on a

$$\frac{\det(\bar{\mathcal{A}})}{\mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}})} \ge \frac{\gamma_1\tau_1\alpha_3\omega r_{min}k_{min}S_{l,min}}{1 + r_{max}^2 + \omega r_{max}(\beta_1 r_{max} + \alpha_3)} > 0$$

Ce qui finalement nous permet de formuler le lemme suivant :

Lemme 2. *Supposons que* $(p(\mathbf{u}), r(\mathbf{u}))$ *vérifie, en plus des hypothèses du lemme 1, l'hypothèse* ***H9****. Si de plus* $\mathbf{u}$ *satisfait l'hypothèse* ***H10****, alors l'opérateur* $\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u})$ *défini par l'équation* (6.22) *est elliptique au sens défini en section 6.1.1.*

6.3.4 Condition de croissance

Sous les mêmes hypothèses que celles du lemme 2, on peut montrer que la condition de croissance (6.5) de la section 6.1.1 est vérifiée. Plus précisément, on a le lemme suivant :

Lemme 3. *Supposons que* $(p(\mathbf{u}), r(\mathbf{u}))$ *vérifie les relations* (6.15) *et* (6.16) *et les hypothèses* ***H8*** *et* ***H9****. Si de plus il existe* r_{min} *et* r_{max} *tels que* $r_{min} \le r(\mathbf{u}) \le r_{max}$*, alors il existe une constante* C *telle que pour tout* $\mathbf{p}$ *on a*

$$|\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \mathbf{p})| \le C\,(1 + |\mathbf{p}|)$$

Démonstration. Partant de la définition de $\mathbf{a}$, on a la relation

$$|\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \mathbf{p})| = |\bar{\mathcal{A}}\nabla\mathbf{u} - \tilde{\mathcal{B}}| \le |\bar{\mathcal{A}}||\nabla\mathbf{u}| + |\tilde{\mathcal{B}}|$$

Il s'agit donc de majorer $|\bar{\mathcal{A}}|$ et $|\tilde{\mathcal{B}}|$ indépendamment de $\mathbf{u}$.

On a vu que si la relation (6.15) et les hypothèses **H8** et **H9** sont vérifiées alors $\bar{\mathcal{A}}$ est une matrice 2×2 réelle symétrique. En considérant de plus que la relation (6.16) est satisfaite, alors la trace et le déterminant de $\bar{\mathcal{A}}$ sont tous deux positifs. On sait ainsi que les valeurs propres de $\bar{\mathcal{A}}$ sont positives et majorées par la trace de $\bar{\mathcal{A}}$, de sorte que

$$|\bar{\mathcal{A}}| \le \mathrm{tr}(\bar{\mathcal{A}}) = \tau_1\gamma_1(1+r^2)k_{r,l} + \tau_1\gamma_1\omega r(\beta_1 r k_{r,g} + \alpha_3 S_l)$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

où $\tau_1 \geq 0$ d'après (6.16). Compte tenu du fait que $k_{r,l} \leq 1$, $k_{r,g} \leq 1$ et $S_l \leq 1$, on obtient ainsi l'inégalité suivante

$$|\bar{\mathcal{A}}| \leq \tau_1\gamma_1 \left(1 + \omega\alpha_3 r + (1+\omega\beta_1)r^2\right)$$

D'autre part, d'après la définition de $\tilde{\mathcal{B}}$, on a

$$|\tilde{\mathcal{B}}|^2 = \beta_2^2 \left(k_{r,l}^2 + (rk_{r,l} + \omega\alpha_1\beta_1 r^2 k_{r,g})^2\right)$$

et comme $k_{r,l} \leq 1$ et $k_{r,g} \leq 1$, on obtient

$$|\tilde{\mathcal{B}}|^2 \leq \beta_2^2 \left(1 + (r + \omega\alpha_1\beta_1 r^2)^2\right)$$

En supposant que $r_{min} \leq r \leq r_{max}$, on obtient ainsi le résultat du lemme avec

$$C = \max_{r\in\{r_{min},r_{max}\}} \Big(\max\Big\{\tau_1\gamma_1\left(1+\omega\alpha_3 r + (1+\omega\beta_1)r^2\right), \beta_2\left(1+(r+\omega\alpha_1\beta_1 r^2)^2\right)^{1/2}\Big\}\Big)$$

□

6.4 Un théorème d'existence

On a finalement déterminé un changement de variable qui permet, sous certaines hypothèses, d'avoir une formulation permettant d'établir l'existence de solutions pour un problème modélisant les écoulements liquide/gaz en milieux poreux avec échanges entre les phases et prenant en compte la disparition de la phase gazeuse. Plus précisément, on formule le théorème suivant :

Théorème 6. *Considérons $0 < T < \infty$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné et connexe à frontière lipschitzienne avec $\Gamma_D \subset \partial\mathcal{D}$, une partie de la frontière de mesure non nulle.*

Soit le problème défini par :

$$(P)\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{b}(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u})\right) = \tilde{\mathcal{F}} \quad \textit{sur }]0;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}(\mathbf{u}) = \mathbf{b}^0 \quad \textit{sur } \{0\}\times\mathcal{D} \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}^D \quad \textit{sur }]0;T[\times\Gamma_D \\ a^j(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u})\cdot\nu = 0 \quad \textit{sur }]0;T[\times(\partial\mathcal{D}\setminus\Gamma_D) \ , j\in\{1,2\} \end{cases}$$

où

- $\mathbf{b}(\mathbf{u})$ *est défini par l'équation* (6.13) *avec, pour* $\tau_1 > 0$, $\tau_2 > 0$ *et* τ_3 *quelconque,*

$$p(\mathbf{u}) = \tau_1 u_1 + \frac{\tau_2}{\omega} e^{\tau_1\omega u_2} + \tau_3 \quad \textit{et} \quad r(\mathbf{u}) = \tau_2 e^{\tau_1\omega u_2} \tag{6.23}$$

- $\mathbf{a}$ *est défini par les équations* (6.22), (6.21), (6.9) *et* (6.10) ;
- $\tilde{\mathcal{F}}$ *est défini par* (6.11).

Alors en supposant que

- $\mathbf{u}^D$ *est dans* $L^2(0,T;H^1(\mathcal{D}))$ *et dans* $L^\infty(]0,T[\times\mathcal{D})$;
- $\partial_t\mathbf{u}^D$ *est dans* $L^1(0,T;L^\infty(\mathcal{D}))$;

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

– *il existe un champ* $\mathbf{u}^0$ *mesurable tel que* $\mathbf{b}^0 = \mathbf{b}(\mathbf{u}^0)$ *et que* $B(\mathbf{u}^0) \in L^1(\mathcal{D})$ *où* $B(\mathbf{z})$ *est défini par* (6.6) *;*

et que de plus l'hypothèse ***H10*** *est satisfaite,*
il existe une solution faible au problème (P) *au sens défini en section 6.1.3.*

Démonstration. Compte tenu des expressions (6.23) de $p(\mathbf{u})$ et de $r(\mathbf{u})$, τ_1 et τ_2 étant positifs, on vérifie que les relations (6.15) et (6.16) et les hypothèses **H8** et **H9** sont bien satisfaites. Le lemme 1 garantie alors l'existence d'un potentiel $\psi(\mathbf{u})$ convexe et C^1 tel que $\mathbf{b} = \nabla_{\mathbf{u}}\psi$. De même, l'hypothèse **H10** étant supposée vérifiée, le lemme 2 nous donne l'ellipticité de $\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{u}), \nabla\mathbf{u})$ au sens de la section 6.1.1.

Enfin, les hypothèses du lemme 3 étant vérifiées, l'inégalité suivante est vérifiée pour tout $\mathbf{p}$ et $\mathbf{z}$

$$|\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{z}), \mathbf{p})| \leq C\,(1 + |\mathbf{p}|)$$

d'où

$$|\mathbf{a}(\mathbf{b}(\mathbf{z}), \mathbf{p})| + |\tilde{\mathcal{F}}| \leq (C + |\tilde{\mathcal{F}}|)\left(1 + B(\mathbf{z})^{1/2} + |\mathbf{p}|\right)$$

La condition de croissance formulée au point **4)** de la section 6.1.1 est donc vérifiée avec $q = 2$ et $c_2 = C + |\tilde{\mathcal{F}}|$.

Le théorème 5 permet alors de conclure à l'existence d'un solution faible pour le problème (P). □

Remarque 2. *Dans le nouveau jeu de variables* $\mathbf{u}$*, on a* $r(\mathbf{u}) > 0$*. C'est-à-dire qu'il n'est pas possible de prendre en compte un état où la phase liquide est composée d'eau strictement pure* $(r = 0)$ *dans le nouveau modèle* (P)*, mais uniquement un état de l'eau avec une concentration résiduelle d'hydrogène dissout* $(r = r_{min})$*.*

Remarque 3. *Etant donnés les expressions de* $p(\mathbf{u})$ *et de* $r(\mathbf{u})$*, l'hypothèse* ***H10*** *requiert que la solution* $\mathbf{u}$ *soit arbitrairement bornée. L'établissement d'estimations* a priori *de ce type est difficile et n'est pas proposé dans ce manuscrit.*

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 7

Simulation numérique : mise en œuvre et premiers résultats

On a construit dans le chapitre 5 un modèle pour les écoulements liquide/gaz en milieux poreux capable de prendre en compte l'apparition/disparition de la phase gazeuse. Le modèle obtenu consiste en un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires qui peut s'écrire comme on va le voir sous une forme matricielle du type :

$$\frac{\partial \mathbf{b}(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{u} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{u}\right) = \mathbf{F}$$

La première partie présente une approche pour la simulation numérique de ce modèle. Cette dernière s'appuie sur l'utilisation du code de calcul modulaire *Cast3m* ([CEA]) qui fournit entre autre différentes méthodes de discrétisation spatiale et de résolution de systèmes linéaires. Dans ce contexte, on propose une mise en œuvre numérique du modèle utilisant une discrétisation implicite en temps et une méthode de volumes finis pour la discrétisation en espace, la non linéarité étant traitée par une méthode de quasi-Newton.

On présente, dans une seconde partie, différents cas test qui illustrent les capacités du modèle et du code développé à prendre en compte l'apparition/disparition de la phase gazeuse, les milieux poreux hétérogènes ou encore les conditions initiales hors équilibre.

7.1 Mise en œuvre

On considère le modèle d'écoulement diphasique décrit par le système (5.5)-(5.6). Ce modèle peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{b}(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{u} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{u}\right) = \mathbf{F} \tag{7.1}$$

avec

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_l + \rho_l^{std} g z \\ R_s \end{pmatrix} \tag{7.2}$$

où z représente l'altitude (*i.e.* -$g\nabla z$=$\mathbf{g}$). Et avec, en notant $R_s(\mathbf{u}) = u_2$, $p_l(\mathbf{u}) = u_1 - \rho_l^{std} g z$, $S_g(\mathbf{u}) = f\left(\frac{R_s(\mathbf{u})}{C_h} - p_l(\mathbf{u})\right)$ et $a(S_g) = 1 + (\omega - 1)S_g$:

$$\mathbf{b}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} -\Phi S_g \\ \Phi a(S_g) R_s \end{pmatrix} \; ; \; \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{F}^w}{\rho_l^{std}} \\ \frac{\mathcal{F}^h}{\rho_g^{std}} \end{pmatrix} \; ;$$

$$D_{1,1}(\mathbf{u}) = \mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l} \; ; \; D_{1,2}(\mathbf{u}) = -\frac{F}{G}\frac{\Phi(1-S_g)}{F+R_s} D_l^h \; ; \; D_{2,1}(\mathbf{u}) = 0 \; ;$$

$$D_{2,2}(\mathbf{u}) = \mathbb{K}\frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g}\frac{\omega}{C_h} R_s + \frac{\Phi F(1-S_g)}{F+R_s} D_l^h \; ;$$

$$C_{1,1}(\mathbf{u}) = C_{2,1}(\mathbf{u}) = 0 \; ; \; C_{1,2}(\mathbf{u}) = -\rho_g^{std} g \mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l}\nabla z \quad \text{et}$$

$$C_{2,2}(\mathbf{u}) = \mathbb{K}\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l}\nabla(p_l + \rho_l^{std} g z) - \mathbb{K}\left(\frac{k_{r,l}(S_g)}{\mu_l} + \omega^2 \frac{k_{r,g}(S_g)}{\mu_g}\right)\rho_g^{std} g R_s \nabla z \tag{7.3}$$

On suppose dans toute la suite que les fonctions f, $k_{r,l}$ et $k_{r,g}$ sont différentiables et que f', $f' \times k'_{r,l} \circ f$ et $f' \times k'_{r,g} \circ f$ sont toutes bornées. On peut voir que ce dernier point revient à supposer qu'il existe $\varepsilon > 0$ tel que $p'_c(S) > \varepsilon$ pour tout $S \in [0;1]$ et que, pour $\alpha \in \{l, g\}$, $k'_{r,\alpha}(S)/p'_c(S)$ est borné pour tout $S \in [0;1]$. Ces hypothèses nous garantissent que $\mathbf{b}(\mathbf{u})$, $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ et $\mathbf{C}(\mathbf{u})$ sont différentiables.

Pour $T > 0$ un temps final et $\mathcal{D}$ un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ de frontière $\partial\mathcal{D} = \Gamma^D \cup \Gamma^N$, on cherche donc à résoudre numériquement le problème suivant :

$$\frac{\partial \mathbf{b}(\mathbf{u})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{u} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{u}\right) = \mathbf{F} \quad \text{sur }]0;T[\times\mathcal{D} \tag{7.4}$$

$$\mathbf{u}(0,x) = \mathbf{u}^0 \quad \text{sur } \mathcal{D} \tag{7.5}$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^D \quad \text{sur }]0;T[\times\Gamma^D \tag{7.6}$$

$$\phi^j \cdot \nu = \phi^{j,N} \cdot \nu \quad \text{sur }]0;T[\times\Gamma^N \; , j \in \{w, h\} \tag{7.7}$$

où

$$\phi^w = \rho_l^{std}\left(D_{1,1}(\mathbf{u})\nabla u_1 + D_{1,2}(\mathbf{u})\nabla u_2 + C_{1,1}(\mathbf{u})u_1 + C_{1,2}(\mathbf{u})u_2\right) \tag{7.8}$$

$$\phi^h = \rho_g^{std}\left(D_{2,1}(\mathbf{u})\nabla u_1 + D_{2,2}(\mathbf{u})\nabla u_2 + C_{2,1}(\mathbf{u})u_1 + C_{2,2}(\mathbf{u})u_2\right) \tag{7.9}$$

sont les flux massiques respectivement du composant eau et du composant hydrogène et où ν est la normale unitaire sortante du domaine. On écrira encore l'équation (7.7) sous la forme suivante :

$$\left(\mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{u} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{u}\right) \cdot \nu = \boldsymbol{\phi}^N \cdot \nu \quad \text{sur }]0;T[\times\Gamma^N \tag{7.10}$$

où l'on définit

$$\boldsymbol{\phi}^N \equiv \begin{pmatrix} \phi^w/\rho_l^{std} \\ \phi^h/\rho_g^{std} \end{pmatrix}$$

7.1.1 Discrétisation en temps

Considérons la famille $\{t^n\}_{n=0\cdots N_T}$ telle que $t^0 = 0$, $t^{N_T} = T$ et $t^i < t^j$ si $i < j$ et notons, pour $n = 1 \cdots N_T$, $\Delta t^n = t^n - t^{n-1}$. On notera $\mathbf{u}^n(x)$ les champs de $\mathcal{D}$ à valeur

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

dans $\mathbb{R}^2$ qui approximent $\mathbf{u}(t^n, x)$. On considère la discrétisation implicite en temps du problème (7.4)-(7.7) suivante, pour $\mathbf{u}^0$ donné :

$$\left|\begin{array}{l}\text{Pour } n = 1 \cdots N_T,\ \mathbf{u}^n \text{ est solution de}\\ \left\{\begin{array}{c}\dfrac{\mathbf{b}(\mathbf{u}^n) - \mathbf{b}(\mathbf{u}^{n-1})}{\Delta t^n} - \operatorname{div}\left(\mathbf{D}(\mathbf{u}^n)\nabla\mathbf{u}^n + \mathbf{C}(\mathbf{u}^n)\mathbf{u}^n\right) = \mathbf{F}(t^n,\cdot) \quad \text{sur } \mathcal{D}\\ \mathbf{u}^n = \mathbf{u}^D(t^n,\cdot) \quad \text{sur } \Gamma^D\\ \left(\mathbf{D}(\mathbf{u}^n)\nabla\mathbf{u}^n + \mathbf{C}(\mathbf{u}^n)\mathbf{u}^n\right)\cdot\nu = \boldsymbol{\phi}^N(t^n,\cdot)\cdot\nu \quad \text{sur } \Gamma^N\end{array}\right.\end{array}\right. \tag{7.11}$$

7.1.2 Résolution de la non linéarité

Pour n fixé et $\mathbf{u}^{n-1}$ connu, $\mathbf{u}^n(x)$ est donc solution d'un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires. On propose ici de traiter la non linéarité du problème (7.11) par une méthode de "quasi-Newton" (voir par exemple [Sch01] pour une introduction à la méthode de Newton).

Définissons

$$\mathcal{A}(\mathbf{u})\mathbf{v} \equiv -\operatorname{div}\left(\mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{v} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{v}\right)$$

où pour $\mathbf{u}$ donné, $\mathcal{A}(\mathbf{u})$ est un opérateur différentiel linéaire en $\mathbf{v}$, ainsi que

$$\begin{array}{c}\mathcal{F}(\mathbf{u}) \equiv \dfrac{\mathbf{b}(\mathbf{u}) - \mathbf{b}(\mathbf{u}^{n-1})}{\Delta t^n} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\mathbf{u} - \mathbf{F}(t^n,\cdot)\\ \text{et} \quad \mathcal{G}(\mathbf{u}) \equiv \mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{u} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{u} - \boldsymbol{\phi}^N(t^n,\cdot)\end{array}$$

de sorte que $\mathbf{u}^n$ est alors solution de

$$\left\{\begin{array}{c}\mathcal{F}(\mathbf{u}^n) = 0 \quad \text{sur } \mathcal{D}\\ \mathbf{u}^n = \mathbf{u}^D(t^n,\cdot) \quad \text{sur } \Gamma^D\\ \mathcal{G}(\mathbf{u}^n)\cdot\nu = 0 \quad \text{sur } \Gamma^N\end{array}\right.$$

La méthode de Newton pour un tel problème consiste à construire la suite $(\mathbf{u}_i^n)_i$ définie par

$$\left|\begin{array}{l}\bullet\ \mathbf{u}_0^n \text{ donné}\\ \bullet\ \text{Pour } i \geq 0,\ \mathbf{u}_{i+1}^n = \mathbf{u}_i^n + \Delta\mathbf{u}_i^n\\ \quad \text{où } \Delta\mathbf{u}_i^n \text{ est solution du problème}\\ \qquad \left\{\begin{array}{c}D\mathcal{F}(\mathbf{u}_i^n)\Delta\mathbf{u}_i^n = -\mathcal{F}(\mathbf{u}_i^n) \quad \text{sur } \mathcal{D}\\ \Delta\mathbf{u}_i^n = \mathbf{u}^D(t^n,\cdot) - \mathbf{u}_i^n \quad \text{sur } \Gamma^D\\ \left(D\mathcal{G}(\mathbf{u}_i^n)\Delta\mathbf{u}_i^n\right)\cdot\nu = -\mathcal{G}(\mathbf{u}_i^n)\cdot\nu \quad \text{sur } \Gamma^N\end{array}\right.\end{array}\right.$$

où $D\mathcal{F}(\mathbf{u})$ et $D\mathcal{G}(\mathbf{u})$ sont respectivement la différentielle de $\mathcal{F}$ et la différentielle de $\mathcal{G}$ en $\mathbf{u}$.

Formellement, on peut calculer que

$$D\mathcal{G}(\mathbf{u})\mathbf{v} = \mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{v} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{v} + \left(D\mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{v}\right)\nabla\mathbf{u} + \left(D\mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{v}\right)\mathbf{u}$$

et

$$\begin{aligned}D\mathcal{F}(\mathbf{u})\mathbf{v} &= \frac{1}{\Delta t^n}D\mathbf{b}(\mathbf{u})\mathbf{v} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\mathbf{v} + \left(D\mathcal{A}(\mathbf{u})\mathbf{v}\right)\mathbf{u}\\ &= \left(\frac{1}{\Delta t^n}J_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}) + \mathcal{A}(\mathbf{u})\right)\mathbf{v} + \left(D\mathcal{A}(\mathbf{u})\mathbf{v}\right)\mathbf{u}\end{aligned}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

où $J_{\mathbf{b}}$ est la jacobienne de $\mathbf{b}$. Notons

$$\mathcal{J}(\mathbf{u})\mathbf{v} \equiv \left(\frac{1}{\Delta t^n} J_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}) + \mathcal{A}(\mathbf{u})\right)\mathbf{v}$$

Les termes $(D\mathcal{A}(\mathbf{u})\mathbf{v})\,\mathbf{u}$ et $((D\mathbf{D}(\mathbf{u})\mathbf{v})\,\nabla\mathbf{u} + (D\mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{v})\,\mathbf{u})$ peuvent donner lieu à des équations aux dérivées partielles en $\mathbf{v}$ peu conventionnelles. Pour simplifier les problèmes linéaires intermédiaires à résoudre, on se propose donc "d'approcher" $D\mathcal{F}(\mathbf{u})$ par $\mathcal{J}(\mathbf{u})$ d'une part et $D\mathcal{G}(\mathbf{u})\mathbf{v}$ par $\mathbf{D}(\mathbf{u})\nabla\mathbf{v} + \mathbf{C}(\mathbf{u})\mathbf{v}$ d'autre part. Ce faisant, on définit donc une méthode de "quasi-Newton" en construisant la suite $(\mathbf{u}_i^n)_i$ définie par

$$\left|\begin{array}{l} \bullet\ \mathbf{u}_0^n \text{ donné} \\ \bullet\ \text{Pour } i \geq 0,\ \mathbf{u}_{i+1}^n = \mathbf{u}_i^n + \Delta\mathbf{u}_i^n \\ \quad \text{où } \Delta\mathbf{u}_i^n \text{ est solution du problème} \\ \quad \left\{\begin{array}{r} \mathcal{J}(\mathbf{u}_i^n)\Delta\mathbf{u}_i^n = -\mathcal{F}(\mathbf{u}_i^n) \quad \text{sur } \mathcal{D} \\ \Delta\mathbf{u}_i^n = \mathbf{u}^D(t^n,\cdot) - \mathbf{u}_i^n \quad \text{sur } \Gamma^D \\ (\mathbf{D}(\mathbf{u}_i^n)\nabla(\Delta\mathbf{u}_i^n) + \mathbf{C}(\mathbf{u}_i^n)(\Delta\mathbf{u}_i^n))\cdot\nu = -\mathcal{G}(\mathbf{u}_i^n)\cdot\nu \quad \text{sur } \Gamma^N \end{array}\right. \end{array}\right. \tag{7.12}$$

Pour n et i fixés, il est intéressant de regarder le problème dont $\mathbf{u}_{i+1}^n$ définie par (7.12) est solution. Concernant l'équation d'évolution, on a :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_{i+1}^n =& \mathcal{J}(\mathbf{u}_i^n)(\mathbf{u}_i^n + \Delta\mathbf{u}_i^n) \\ =& \mathcal{J}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_i^n - \mathcal{F}(\mathbf{u}_i^n) \\ \left(\frac{1}{\Delta t^n} J_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}_i^n) + \mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n)\right)\mathbf{u}_{i+1}^n =& \left(\frac{1}{\Delta t^n} J_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}_i^n) + \mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n)\right)\mathbf{u}_i^n \\ & - \frac{\mathbf{b}(\mathbf{u}_i^n) - \mathbf{b}(\mathbf{u}^{n-1})}{\Delta t^n} - \mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_i^n + \mathbf{F}(t^n,\cdot) \end{aligned}$$

d'où

$$J_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}_i^n)\left(\frac{\mathbf{u}_{i+1}^n - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t^n}\right) + \mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_{i+1}^n = \mathbf{F}(t^n,\cdot) - \frac{\mathbf{b}(\mathbf{u}_i^n) - \mathbf{b}(\mathbf{u}^{n-1})}{\Delta t^n}$$

Finalement, en explicitant le terme $\mathcal{A}(\mathbf{u}_i^n)$, $\mathbf{u}_{i+1}^n$ vérifie :

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}_i^n)\left(\frac{\mathbf{u}_{i+1}^n - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t^n}\right) - \operatorname{div}\left(\mathbf{D}(\mathbf{u}_i^n)\nabla\mathbf{u}_{i+1}^n + \mathbf{C}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_{i+1}^n\right) = & \\ \mathbf{F}(t^n,\cdot) - \frac{\mathbf{b}(\mathbf{u}_i^n) - \mathbf{b}(\mathbf{u}^{n-1})}{\Delta t^n} \qquad \text{sur } \mathcal{D} & \end{aligned} \tag{7.13}$$

Concernant la condition de Dirichlet, on a :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{i+1}^n =& \mathbf{u}_i^n + \Delta\mathbf{u}_i^n \\ =& \mathbf{u}_i^n + \mathbf{u}^D(t^n,\cdot) - \mathbf{u}_i^n \\ =& \mathbf{u}^D(t^n,\cdot) \qquad \text{sur } \Gamma^D \end{aligned} \tag{7.14}$$

Concernant la condition de Neumann, on a :

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}(\mathbf{u}_i^n)\nabla\mathbf{u}_{i+1}^n + \mathbf{C}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_{i+1}^n)\cdot\nu =& (\mathbf{D}(\mathbf{u}_i^n)\nabla\mathbf{u}_i^n + \mathbf{C}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_i^n)\cdot\nu \\ & + (\mathbf{D}(\mathbf{u}_i^n)\nabla(\Delta\mathbf{u}_i^n) + \mathbf{C}(\mathbf{u}_i^n)(\Delta\mathbf{u}_i^n))\cdot\nu \\ =& (\mathbf{D}(\mathbf{u}_i^n)\nabla\mathbf{u}_i^n + \mathbf{C}(\mathbf{u}_i^n)\mathbf{u}_i^n)\cdot\nu - \mathcal{G}(\mathbf{u}_i^n)\cdot\nu \\ =& \boldsymbol{\phi}^N\cdot\nu \qquad \text{sur } \Gamma^N \end{aligned} \tag{7.15}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Il apparait ainsi que $\mathbf{u}_{i+1}^n$ est solution d'un problème elliptique classique défini par (7.13)-(7.14)-(7.15). L'algorithme (7.12) peut donc se réécrire ainsi :

$$\left|\begin{array}{l} \bullet\ \mathbf{u}_0^n \text{ donné} \\ \bullet\ \text{Pour } i \geq 0, \text{ calculer } \mathbf{u}_{i+1}^n \\ \quad \text{solution du problème (7.13)-(7.14)-(7.15)} \end{array}\right. \tag{7.16}$$

7.1.3 Résolution du problème linéaire

L'algorithme (7.16) requiert la résolution du problème (7.13)-(7.14)-(7.15). Pour $\mathbf{u}_i^n$ et $\mathbf{u}^{n-1}$ donnés, ce problème en $\mathbf{u}_{i+1}^n$ est un système d'équations aux dérivées partielles elliptiques linéaires.

Dans un souci de simplicité de l'implémentation, nous n'avons pas développé un code spécifique de résolution des edp linéaires. A la place, nous avons choisi d'utiliser le code de calcul *Cast3m*, qui met à disposition de l'utilisateur plusieurs méthodes de discrétisation en espace des edp linéaires classiques, ainsi que plusieurs méthodes de résolution des systèmes linéaires. Dans ces conditions, un moyen simple de discrétiser notre système d'edp linéaire est d'utiliser une méthode de discrétisation que l'on qualifiera "d'additive".

On entend par méthode de discrétisation "additive" le fait que le système linéaire résultant de la discrétisation de l'edp préserve le caractère linéaire de l'edp par rapport à la solution mais aussi par rapport aux coefficients du problème. En particulier, si l'edp peut s'écrire comme une somme de "sous-edp", alors son système linéaire associé sera égale à la somme des systèmes linéaires associés aux "sous-edp". Si la méthode des éléments finis ou celle des volumes finis présentent bien cette propriété d'additivité, ce n'est par exemple pas le cas de la méthode des éléments finis mixtes hybrides.

En s'appuyant sur cette idée, la discrétisation par la méthode des volumes finis de notre système linéaire de deux edp fournit un système linéaire 2×2 par bloc. Il ne nous a pas été possible de travailler directement sur le système linéaire complet sous *Cast3m*, nous avons donc utilisé la méthode de Gauss-Seidel par bloc pour le résoudre. L'inversion des blocs diagonaux est faite par la méthode du résidu minimal généralisé (GMRES) qui est implémentée dans *Cast3m*.

7.2 Des cas test

On présente dans cette section les résultats de simulation que l'on obtient en utilisant la procédure de résolution que l'on vient de présenter sur différents cas test. Ces cas test ont été construits avec l'idée que chacun soit centré sur un seul problème physique et/ou numérique particulier. Tous ces cas test sont ainsi définis sur une géométrie bi-dimensionnelle très simple (écoulement mono-dimensionnel) et les effets de la gravité sont occultés (écoulement horizontal : l'altitude z est constante).

La géométrie commune à tous les cas test est représentée en figure 7.1. Elle consiste en un domaine rectangulaire $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ scindé en deux sous domaines Ω_1 et Ω_2. La largeur du domaine Ω est L_y et sa longueur, L_x. Les sous domaines Ω_1 et Ω_2 ont respectivement pour longueurs L_1 et $(L_x - L_1)$. La frontière du domaine Ω est découpée en trois parties : Γ_{in}, Γ_{out} et Γ_{imp}. Dans tous les cas test présentés, on imposera des conditions de flux nuls sur la frontière Γ_{imp} qui est donc dite "imperméable". Les cas test proposés diffèrent donc :

- par leurs conditions initiales ;
- par les conditions aux limites imposées en "entrée", *i.e.* sur Γ_{in}, et en "sortie", *i.e.* sur Γ_{out} ;

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

– et par les dimensions et les caractéristiques du milieu poreux.

Les seconds membres $\mathcal{F}^w$ et $\mathcal{F}^h$ (sources volumiques d'eau et d'hydrogène) seront par ailleurs toujours pris nuls : $\mathcal{F}^w = \mathcal{F}^h = 0$.

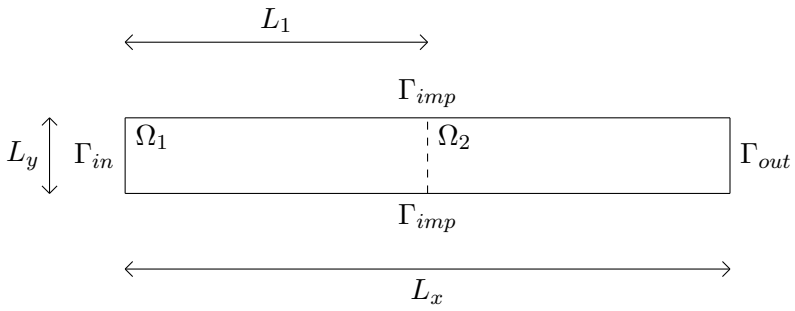


FIGURE 7.1 – Définition de la géométrie des cas test

Dans tous les cas test, on considérera un écoulement eau/hydrogène dont les caractéristiques spécifiques aux fluides et aux composants sont données dans le tableau 7.1

Paramètre	Valeur	
θ	303	K
D_l^h	$3\ 10^{-9}$	m^2/s
μ_l	$1\ 10^{-3}$	$Pa.s$
μ_g	$9\ 10^{-6}$	$Pa.s$
$H(\theta = 303K)$	$7.65\ 10^{-6}$	$mol/Pa/m^3$
M^w	10^{-2}	kg/mol
M^h	$2\ 10^{-3}$	kg/mol
ρ_l^{std}	10^3	kg/m^3
ρ_g^{std}	$8\ 10^{-2}$	kg/m^3

TABLE 7.1 – Valeurs des caractéristiques des fluides et des composants : cas eau/hydrogène

Les fonctions de perméabilité relative et la loi de pression capillaire seront à chaque fois données par le modèle de van Genuchten-Mualem et s'exprimeront donc ainsi :

$$\begin{cases} p_c = P_r \left(S_{le}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n} , \\ kr_l = \sqrt{S_{le}} \left(1 - (1 - S_{le}^{1/m})^m \right)^2 \\ \text{et} \quad kr_g = \sqrt{1 - S_{le}} \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^{2m} \\ \text{avec} \quad S_{le} = \dfrac{S_l - S_{l,res}}{1 - S_{l,res} - S_{g,res}} \quad \text{et} \quad m = 1 - \dfrac{1}{n} \end{cases} \tag{7.17}$$

On considérera de plus que :

– le milieu poreux est isotrope, de sorte que le tenseur de perméabilité absolue est de la forme $\mathbb{K} = k\mathbb{I}_d$ avec k scalaire ;

– le milieu poreux est homogène sur chaque sous domaine Ω_1 et Ω_2.

Le milieu poreux sera alors défini par la donnée des valeurs de : k, Φ, P_r, n, $S_{l,res}$ et $S_{g,res}$.

7.2.1 Cas test 1 : apparition et disparition de la phase gazeuse

Ce premier cas test vise à illustrer la capacité du modèle à prendre en compte l'apparition et la disparition de la phase gazeuse depuis un état totalement saturé en liquide.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

On considère pour cela un milieu poreux homogène initialement saturé en eau pure auquel on impose une injection d'hydrogène ($\mathcal{Q}^h$) en entrée sur la durée $[0; T_{inj}]$ et un état d'eau pure de pression fixée ($p_{l,out}$) en sortie. Les conditions aux limites, les conditions initiales, les caractéristiques du milieu poreux et la géométrie sont données dans le tableau 7.2

Conditions aux limites et Conditions initiales	Milieu poreux		Autre	
	Param.	Valeur sur Ω	Param.	Valeur
$\phi^w \cdot \nu = 0$ sur Γ_{imp}	k	$5\ 10^{-20}\ m^2$	L_x	$200\ m$
$\phi^h \cdot \nu = 0$ sur Γ_{imp}	Φ	$0.15\ (-)$	L_y	$20\ m$
$\phi^w \cdot \nu = 0$ sur Γ_{in}	P_r	$2\ 10^6\ Pa$	L_1	$-\quad -$
$\phi^h \cdot \nu = \mathcal{Q}^h \mathbb{1}_{[0;T_{inj}]}(t)$ sur Γ_{in}	n	$1.49\ (-)$	$p_{l,out}$	$10^6\ Pa$
	$S_{l,res}$	$0.4\ (-)$	$\mathcal{Q}^h$	$5.57\ mg/m^2/an$
$p_l = p_{l,out}$ sur Γ_{out}	$S_{g,res}$	$0\ (-)$	T_{inj}	$5\ 10^5\ ans$
$R_s = 0$ sur Γ_{out}				
$p_l(t=0) = p_{l,out}$ sur Ω				
$R_s(t=0) = 0$ sur Ω				

TABLE 7.2 – Données du cas test 1 : conditions aux limites et initiales, caractéristiques du milieu poreux et géométrie

Résultats numériques : présentation

La simulation de ce cas test a été effectuée sur une durée allant de $t = 0\ ans$ à $t = T_{fin} = 10^6\ ans$; le pas d'espace a été pris constant égal à $1\ m$ et le pas de temps variable, allant de $10^2\ ans$ en début de simulation à $10^4\ ans$ en fin de simulation. Les figures 7.2, 7.3, 7.4 et 7.5 représentent les profils, en différents temps, de la pression du liquide, p_l, de la concentration d'hydrogène dissout, $\frac{\rho_g^{std}}{M^h} R_s$, et de la saturation en gaz, S_g. Les figures 7.6, 7.7 et 7.8 présentent l'évolution en temps de différents indicateurs : pressions des phases, p_l et R_s/C_h, et saturation en gaz, S_g, en entrée, Γ_{in}, sur la figure 7.6 ; flux d'eau et d'hydrogène, ϕ^w et ϕ^h, en sortie, Γ_{out}, sur la figure 7.7 ; position du front de saturation sur la figure 7.8.

Remarque 4. *Sur le graphique des pressions en entrée de la figure 7.6, on parle de la pression du gaz alors qu'il s'agit plus précisément de la quantité R_s/C_h et non pas de la quantité p_g. Si l'on se réfère à la section 4.2.9, on voit que R_s/C_h correspond à la* pression d'équilibre thermodynamique du gaz *et que, quand la phase de gaz existe ($S_g > 0$), on a bien $p_g = R_s/C_h$. Tandis que p_g n'est pas défini en l'absence de gaz ($S_g = 0$), la quantité R_s/C_h reste bien définie. Ainsi, quand on voit apparaître sur la figure 7.6 une pression du gaz inférieur à la pression du liquide, il ne s'agit pas de la pression d'une phase inexistante mais de la* pression d'équilibre thermodynamique du gaz *qui est simplement une quantité proportionnelle à la concentration d'hydrogène dissout.*

On procède dans ce qui suit à une description fine des résultats figurant sur les figures 7.2 à 7.8. L'analyse complète de ces résultats est proposée directement dans la section suivante.

Les deux premières figures, 7.2 et 7.3, correspondent à la période d'injection d'hydrogène : $[0; T_{inj}]$. On peut distinguer trois phases durant cette période :

– Pour $0\ ans < t < 1.9\ 10^4\ ans$ (cf figure 7.2), seule la concentration d'hydrogène, R_s, évolue, le milieu poreux restant totalement saturé en eau ($S_g = 0$) et la pression du liquide, p_l, reste uniforme et égale à sa valeur initiale de $10^6\ Pa$.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

- Pour $1.9\,10^4\ ans < t < 1.2\,10^5\ ans$ (cf figure 7.2), la concentration d'hydrogène, R_s, continue de croître mais désormais la pression du liquide, p_l, et la saturation en gaz, S_g, augmentent aussi. On notera que S_g ne croît pas sur tout le domaine mais reste nulle sur une partie du domaine, la taille de cette zone diminuant au cours du temps.
- Pour $1.2\,10^5\ ans < t < 5\,10^5\ ans = T_{inj}$ (cf figure 7.3), la pression du liquide, p_l, se met à décroître, tendant vers une répartition uniforme de $10^6\ Pa$ tandis que la concentration d'hydrogène, R_s, et la saturation en gaz, S_g, continuent d'évoluer dans le même sens que précédemment bien qu'avec une vitesse d'évolution décroissante.

Les figures 7.4 et 7.5 correspondent à la période post-injection, $[T_{inj}, T_{fin}]$. De la même manière, on distingue trois phases durant cette période :

- Pour $T_{inj} = 5\,10^5\ ans < t < 5.6\,10^5\ ans$ (cf figure 7.4), la pression du liquide, p_l, décroît sous la valeur de $10^6\ Pa$, la concentration d'hydrogène, R_s, et la saturation en gaz, S_g, diminuant aussi, tandis que la taille de la zone saturée en eau ($S_g = 0$) augmente.
- Pour $5.6\,10^5\ ans < t < 6.6\,10^5\ ans$ (cf figure 7.5), la pression du liquide, p_l, se met à croître, tendant vers une répartition uniforme de $10^6\ Pa$ tandis que la concentration d'hydrogène, R_s, et la saturation en gaz, S_g, continuent d'évoluer dans le même sens que précédemment, la taille de la zone insaturée ($S_g > 0$) diminuant jusqu'à être nulle.
- Pour $6.6\ 10^5\ ans < t < 10^6\ ans = T_{fin}$ (cf figure 7.5), seule la concentration d'hydrogène, R_s, évolue en continuant sa décroissance vers une répartition uniforme de valeur nulle, la saturation en gaz, S_g, et la pression du liquide, p_l, étant toutes deux constantes et uniformes sur cette phase.

On retrouve ces six phases dans l'observation de l'évolution temporelle de la pression du liquide, p_l, de la *pression d'équilibre thermodynamique du gaz*, R_s/C_h, et de la saturation en gaz, S_g, en entrée, *i.e.* en Γ_{in}, (cf figure 7.6) et de la position du front de saturation (cf figure 7.8).

L'évolution temporelle des flux d'eau, ϕ^w, et d'hydrogène, ϕ^h, en sortie, *i.e.* sur Γ_{out}, présentée en figure 7.7 suit elle aussi ces différentes phases :

- Pour $0\ ans < t < 1.9\,10^4\ ans$, les deux flux sont quasi nuls.
- Pour $1.9\,10^4\ ans < t < 1.2\,10^5\ ans$, les deux flux sont croissants.
- Pour $1.2\,10^5\ ans < t < 5\,10^5\ ans = T_{inj}$, le flux d'hydrogène continue de croître tandis que le flux d'eau décroît jusqu'à une valeur quasi nulle.
- Pour $T_{inj} = 5\,10^5\ ans < t < 5.6\,10^5\ ans$, les deux flux sont décroissants, le flux d'eau étant alors négatif.
- Pour $5.6\,10^5\ ans < t < 6.6\,10^5\ ans$, le flux d'hydrogène continue de décroître tandis que le flux d'eau croît jusqu'à zéro.
- Pour $6.6\,10^5\ ans < t < 10^6\ ans = T_{fin}$, le flux d'hydrogène continue de décroître vers zéro tandis que le flux d'eau reste constant égal à zéro.

Résultats numériques : analyse

Ces résultats peuvent s'analyser de la manière suivante :

- Pour $0\ ans < t < 1.9\,10^4\ ans$, tout l'hydrogène injecté en entrée se dissout dans le liquide, le milieu poreux restant totalement saturé en liquide ($R_s < C_h p_l$). Il n'y a pas d'écoulement de la phase liquide et le seul mode de transport de l'hydrogène est le mécanisme de diffusion de l'hydrogène dissout dans la phase liquide. La concentration d'hydrogène dissout en entrée augmente jusqu'à atteindre la valeur critique ($R_s = C_h p_l$) en $t = 1.9\,10^4\ ans$.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

- Pour $1.9 10^4\ ans < t < 1.2 10^5\ ans$, il y a apparition d'une phase gazeuse dans la zone où $R_s > C_h p_l$. Le liquide est alors "poussé" par le gaz ($p_g > p_l$) et un écoulement de la phase liquide apparaît. Cet écoulement correspond à un gradient de la pression liquide et on observe donc l'augmentation de p_l en conséquence. Le transport de l'hydrogène est désormais assuré par trois mécanismes : la diffusion dans le liquide et la convection par le liquide pour la part dissoute, ainsi que l'écoulement de la phase gazeuse dans la zone insaturée pour la part à l'état gazeux. En conséquence, le flux d'hydrogène en sortie se met à augmenter de manière significative.
- Pour $1.2 10^5\ ans < t < 5 10^5\ ans = T_{inj}$, si la phase liquide continue de s'écouler vers la sortie, cet écoulement ne peut se poursuivre indéfiniment en raison du flux d'eau nul imposé en entrée. La vitesse d'écoulement du liquide (*i.e.* le gradient de pression liquide) se met donc à diminuer et avec elle la pression du liquide dans l'ensemble du domaine. L'écoulement global se rapproche progressivement d'un état stationnaire et on constate que les flux sortants d'eau et d'hydrogène tendent vers les valeurs des flux imposés en entrée.
- Pour $t > T_{inj}$, l'injection d'hydrogène en entrée est désormais coupée. On s'attend donc à voir évoluer le système son état d'équilibre, à savoir $p_l = 10^6\ pa$ et $R_s = 0$ sur tout le domaine.
- Pour $T_{inj} = 5\ 10^5\ ans < t < 6.6\ 10^5\ ans$, le front de saturation qui délimite le passage de la zone insaturée à la zone totalement saturée recule jusqu'à la disparition complète de la phase gazeuse dans le milieu poreux au temps $t = 6.6\ 10^5\ ans$. Dans le même temps, l'eau reflue dans le milieu poreux comme en témoigne le flux sortant d'eau qui est désormais négatif. Ceci entraine une chute brutale du flux d'hydrogène sortant, en effet ce flux est composé de composantes contraires : la diffusion dans le liquide de l'hydrogène dissout vers l'extérieur et sa convection par le liquide vers l'intérieur.
- Pour $t > 6.6\ 10^5\ ans$, le milieu poreux est désormais totalement saturé en eau et la pression du liquide est uniforme : l'écoulement du liquide est nul dans tout le domaine. L'hydrogène n'existe plus que sous forme dissoute dans tout le domaine et son seul mode de transport est la diffusion dans le liquide. Il continue à s'échapper en sortie du domaine par ce mode, la concentration d'hydrogène tendant ainsi progressivement vers zéro dans tout le domaine.

Ces résultats numériques illustrent la capacité de notre modèle unifié et de sa mise en œuvre à traiter pleinement l'apparition, l'évolution et la disparition de la phase gazeuse dans un écoulement diphasique eau/hydrogène en milieux poreux. Ces phénomènes se retrouvant dans les simulations présentées dans la suite, nous nous sommes attaché ici à décrire ces premiers résultats de manière aussi exhaustive que possible.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

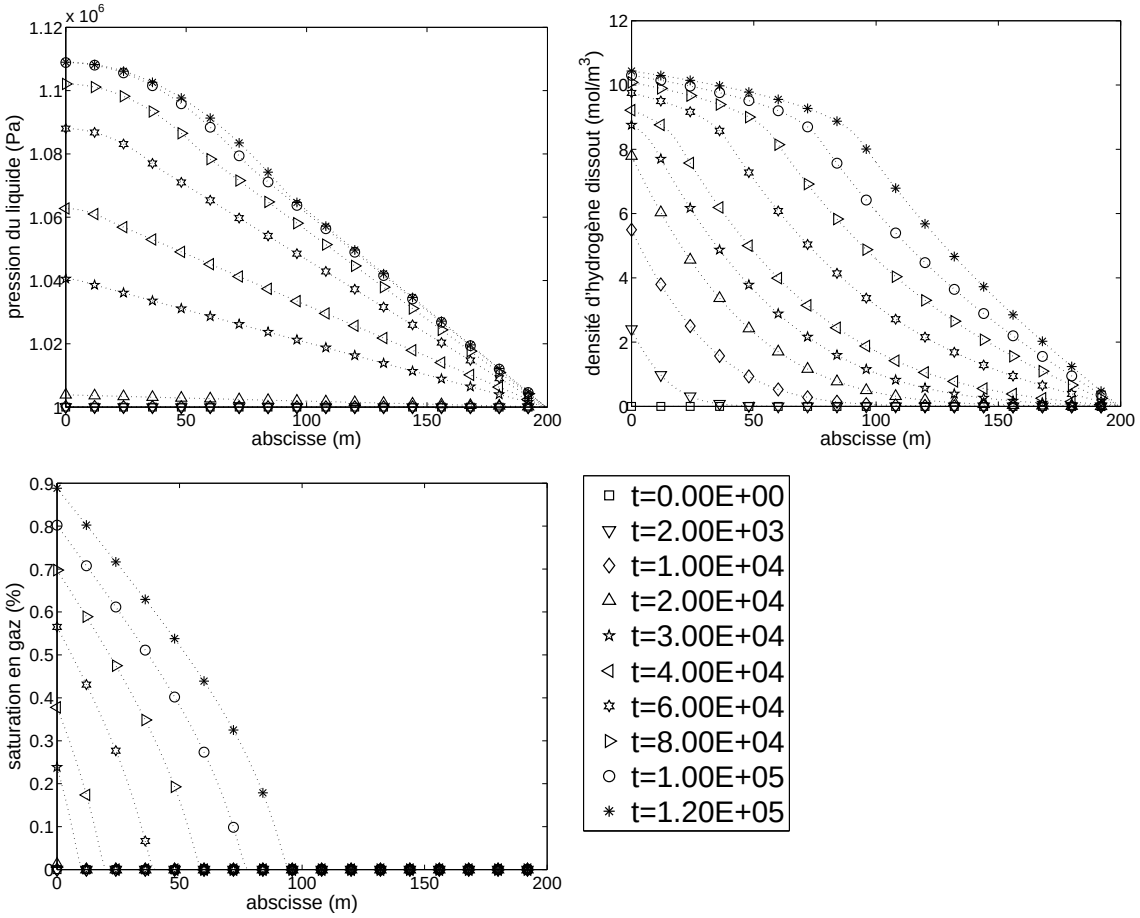


FIGURE 7.2 – cas test 1 : phase 1

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

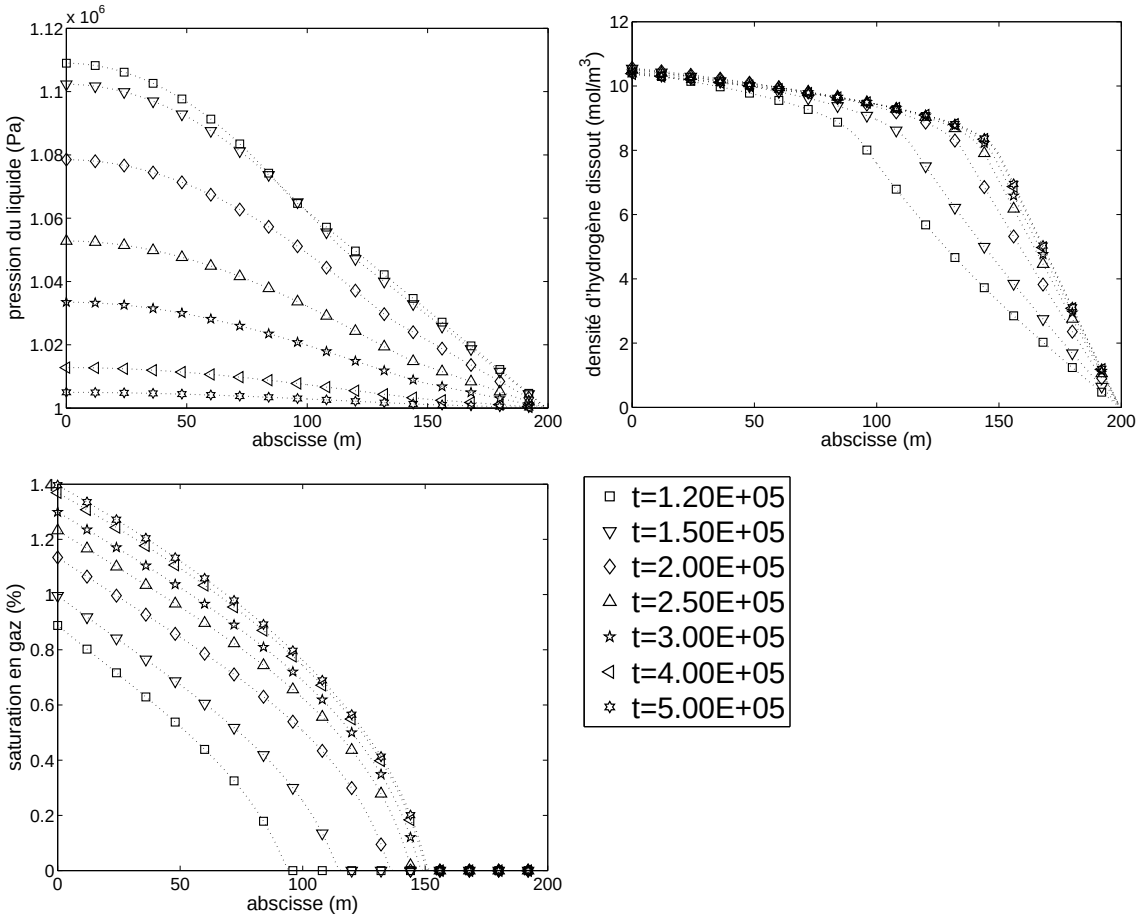


FIGURE 7.3 – cas test 1 : phase 2

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

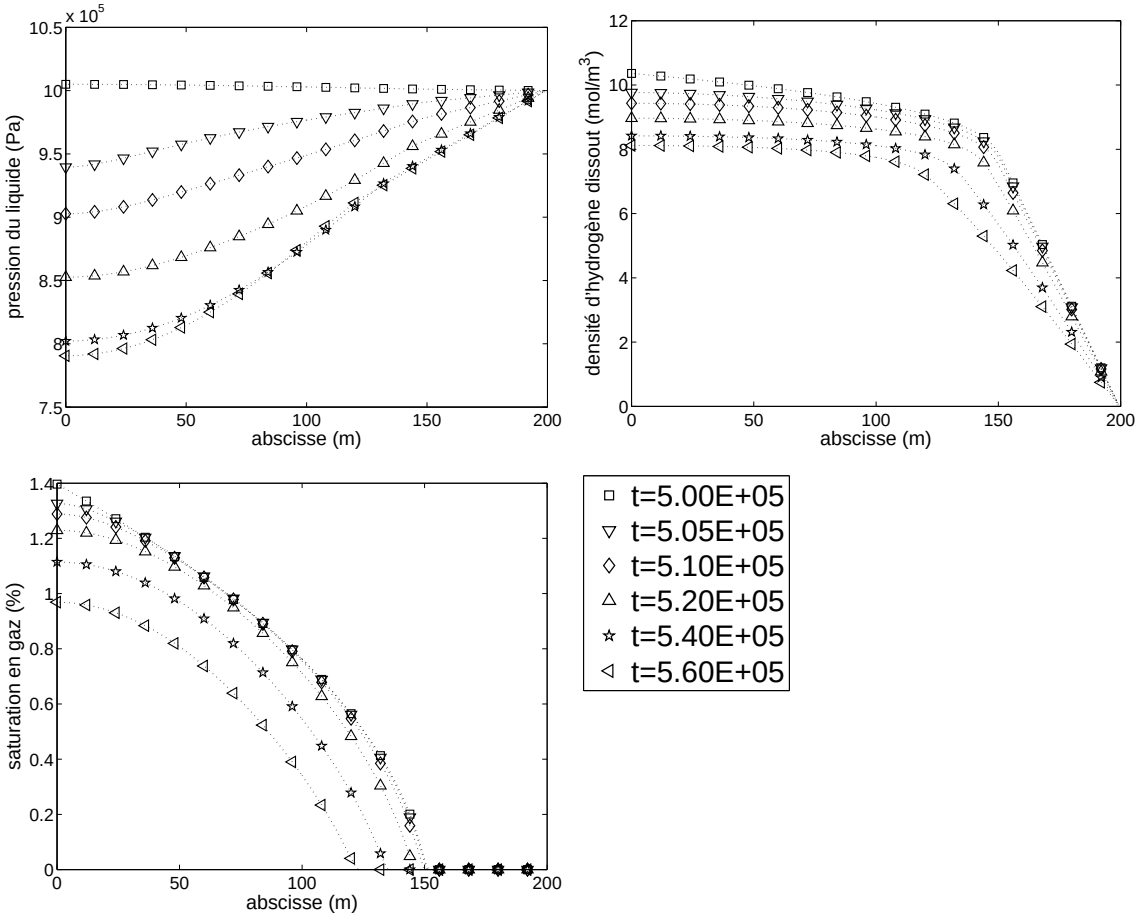


FIGURE 7.4 – cas test 1 : phase 3

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

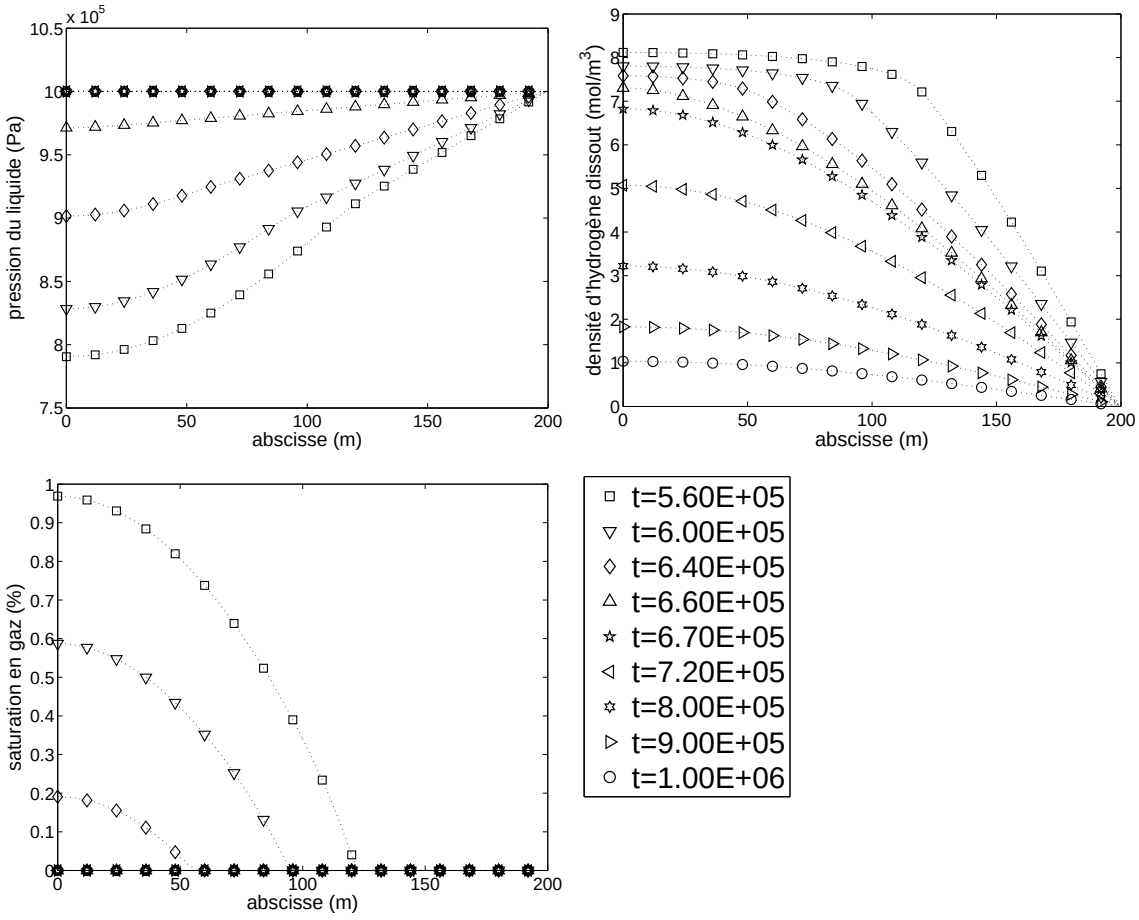


FIGURE 7.5 – cas test 1 : phase 4

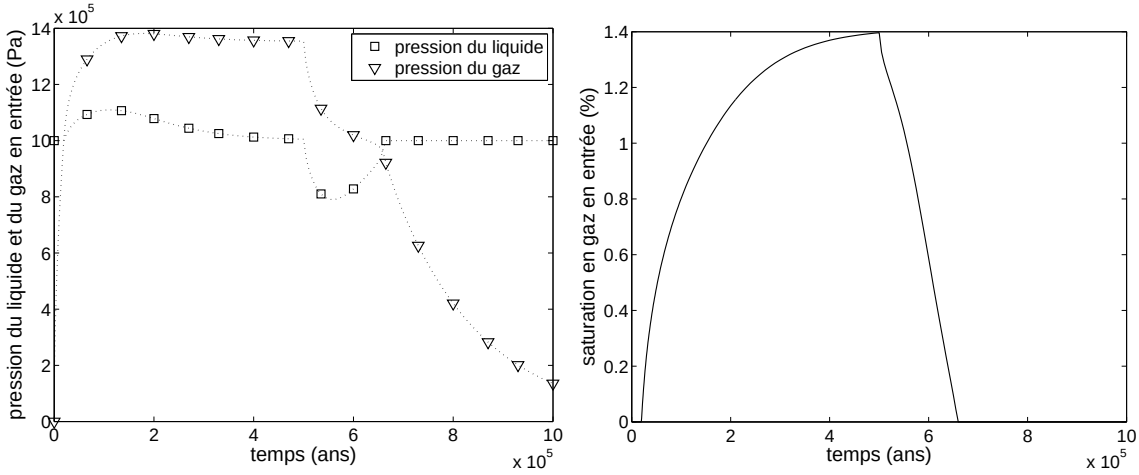


FIGURE 7.6 – cas test 1 : indicateurs en entrée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

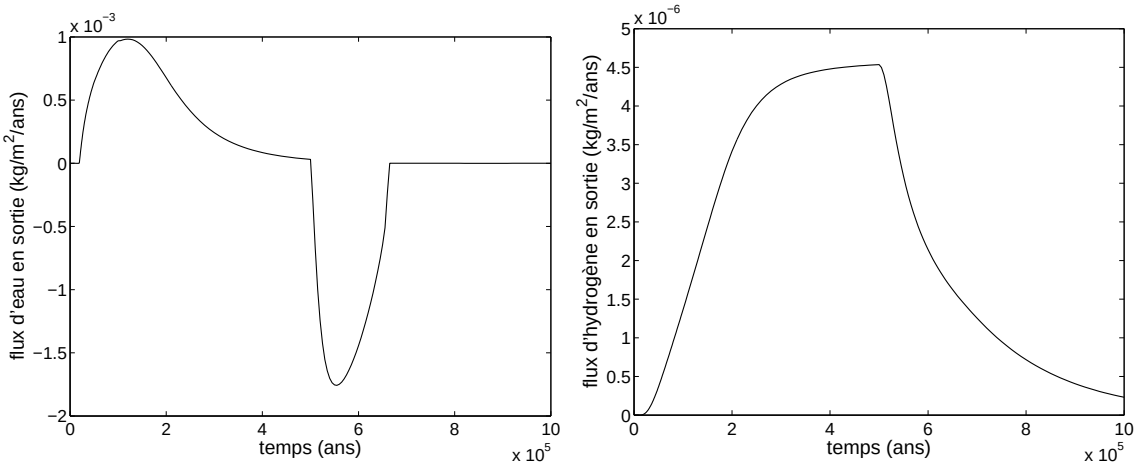


FIGURE 7.7 – cas test 1 : indicateurs en sortie

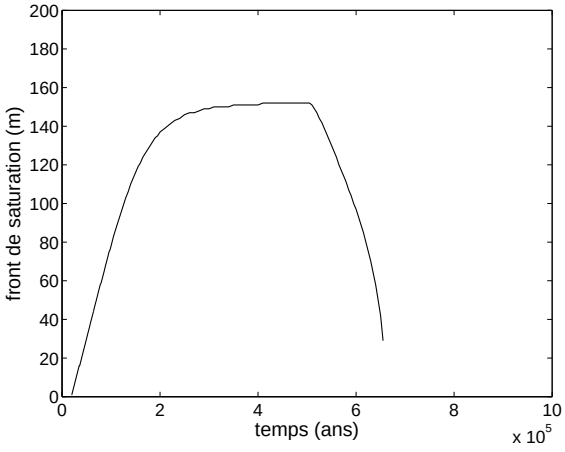


FIGURE 7.8 – cas test 1 : position du front de saturation

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

7.2.2 Cas test 2 : milieu hétérogène

Ce second cas test est une variation du premier. On y reprend le concept d'une injection d'hydrogène, constante dans le temps ici, dans un milieu poreux initialement saturé en eau pure, à la différence que le milieu poreux n'est plus homogène mais désormais constitué de deux matériaux homogènes adjacents. Les données de ce cas test sont indiquées dans le tableau 7.3.

Conditions aux limites et Conditions initiales	Milieu poreux		Autre	
	Param.	Valeur sur Ω_1	Param.	Valeur
$\phi^w \cdot \nu = 0$ sur Γ_{imp}	k	10^{-18} m^2	L_x	200 m
$\phi^h \cdot \nu = 0$ sur Γ_{imp}	Φ	0.3 $(-)$	L_y	20 m
$\phi^w \cdot \nu = 0$ sur Γ_{in}	P_r	$2\ 10^6$ Pa	L_1	20 m
$\phi^h \cdot \nu = \mathcal{Q}^h$ sur Γ_{in}	n	1.54 $(-)$	$p_{l,out}$	10^6 Pa
$p_l = p_{l,out}$ sur Γ_{out}	$S_{l,res}$	0.01 $(-)$	$\mathcal{Q}^h$	5.57 $mg/m^2/an$
$R_s = 0$ sur Γ_{out}	$S_{g,res}$	0 $(-)$		
$p_l(t=0) = p_{l,out}$ sur Ω	Param.	Valeur sur Ω_2		
$R_s(t=0) = 0$ sur Ω	k	$5\ 10^{-20}$ m^2		
	Φ	0.15 $(-)$		
	P_r	$15\ 10^6$ Pa		
	n	1.49 $(-)$		
	$S_{l,res}$	0.4 $(-)$		
	$S_{g,res}$	0 $(-)$		

TABLE 7.3 – Données du cas test 2 : conditions aux limites et initiales, caractéristiques du milieu poreux et géométrie

Résultats numériques : présentation

La simulation de ce cas test a été effectuée sur une durée allant de $t = 0$ ans à $t = T_{fin} = 10^6$ ans ; le pas d'espace a été pris constant égal à 1 m et le pas de temps variable, allant de 10^2 ans en début de simulation à $2\ 10^4$ ans en fin de simulation. La figure 7.9 représente les profils, en différents temps, de la pression du liquide, p_l, de la concentration d'hydrogène dissout, $\frac{\rho_g^{std}}{M^h} R_s$, et de la saturation en gaz, S_g. Les figures 7.10, 7.11 et 7.12 présentent l'évolution en temps de différents indicateurs : pressions des phases, p_l et R_s/C_h (voir la remarque 4), et saturation en gaz, S_g, en entrée, Γ_{in}, sur la figure 7.10 ; flux d'eau et d'hydrogène, ϕ^w et ϕ^h, en sortie, Γ_{out}, sur la figure 7.11 ; position du front de saturation sur la figure 7.12.

L'évolution de ces différentes grandeurs est qualitativement analogue à celle observée durant la période d'injection du cas test 1 en section précédente. A la différence notable, toutefois, des profils de saturation en gaz qui présentent une discontinuité en $x = 20$ m. On distingue ainsi quatre phases au cours de la simulation :

- Pour 0 $ans < t < 3.8\ 10^4$ ans, la saturation en gaz et la pression du liquide restent constantes sur tout le domaine tandis que la concentration d'hydrogène augmente. Les flux sortants d'eau et d'hydrogène sont nuls.
- Pour $3.8\ 10^4$ $ans < t < 5.4\ 10^4$ ans, la pression du liquide et la concentration d'hydrogène augmentent sur l'ensemble du domaine. La saturation en gaz augmente aussi sur une partie croissante du domaine. Le front de saturation se déplace pour atteindre la position $x = 20$ m au temps $t = 5.4\ 10^4$ ans. Les flux sortants d'eau et d'hydrogène sont croissants.
- Pour $5.4\ 10^4$ $ans < t < 1.3\ 10^5$ ans, l'évolution se poursuit dans le même sens. Le front de saturation dépasse la position $x = 20$ m et le profil de saturation présente

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

désormais une discontinuité en $x = 20\ m$.

– Pour $1.310^5\ ans < t < 10^6\ \ ans = T_{fin}$, la concentration d'hydrogène et la saturation en gaz continuent de croître tandis que la pression liquide diminue vers zéro sur l'ensemble du domaine. Le flux d'hydrogène continue d'augmenter tandis que le flux décroit vers zéro. Le front de saturation continue de progresser pour tendre vers la position $x \approx 150\ m$.

Résultats numériques : analyse

Jusqu'à ce que le front de saturation atteigne l'interface entre les deux milieux poreux ($t = 5.4\ 10^4\ \ ans$), le phénomène d'apparition et d'évolution de la phase gazeuse et de la zone insaturée est identique à ce qui ce passe dans le cas test 1 durant la période d'injection. L'hydrogène dissout s'accumulant en entrée jusqu'à "saturer" le liquide en hydrogène, la phase gazeuse apparait alors ($t > 3.8\ 10^4\ ans$).

Lorsque le front de saturation dépasse l'interface entre les deux milieux poreux ($t > 5.4\ 10^4\ \ ans$), la saturation en gaz est non nulle de part et d'autre de l'interface et on observe une discontinuité de la saturation au niveau de cette interface. Ceci s'explique par la différence des lois de pression capillaire de chaque roche. En effet, si l'on note $p_c^{(1)}$ et $p_c^{(2)}$ la loi de pression capillaire de chaque roche, la continuité des pressions des phases impose que $p_c^{(1)} = p_c^{(2)}$ au niveau de l'interface. Ses deux fonctions étant différentes, il y a donc deux valeurs distinctes de la saturation, $S_g^{(1)}$ et $S_g^{(2)}$, de part et d'autre de l'interface de manière assurer l'égalité : $p_c^{(1)}(S_g^{(1)}) = p_c^{(2)}(S_g^{(2)})$.

De la même manière que dans le cas test 1, le système poursuit son évolution vers un état stationnaire où les flux entrants et sortants s'équilibrent, le flux d'eau sortant atteignant son maximum en $t = 1.3\ 10^5\ ans$ pour tendre ensuite vers zéro.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

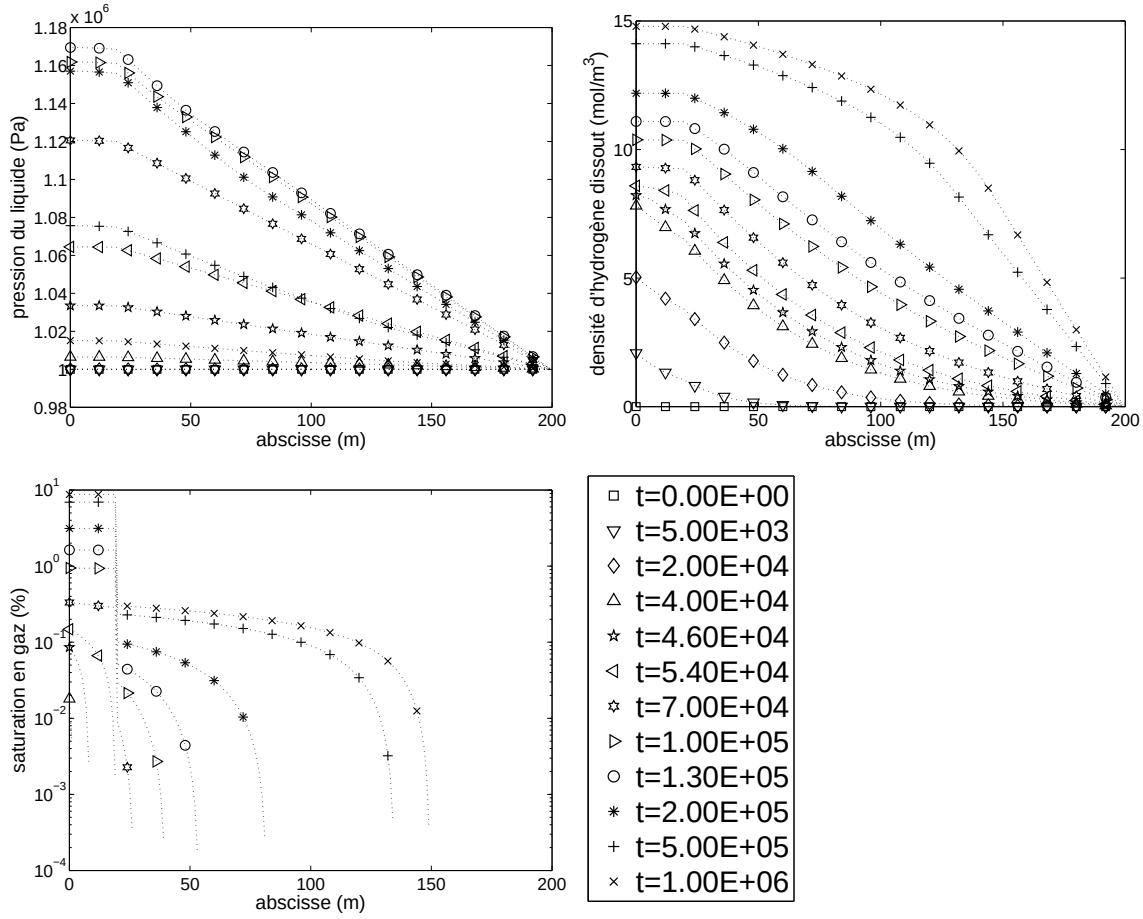


FIGURE 7.9 – cas test 2

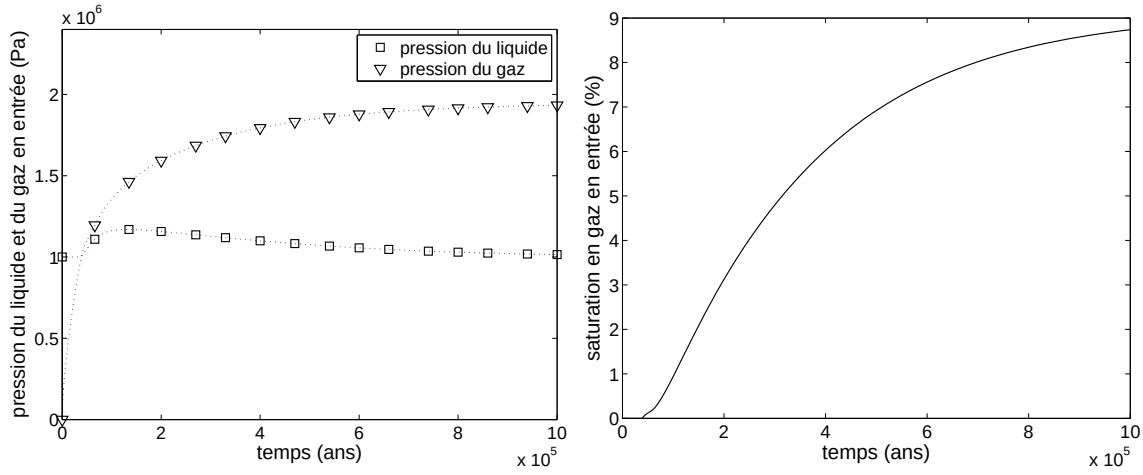


FIGURE 7.10 – cas test 2 : indicateurs en entrée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

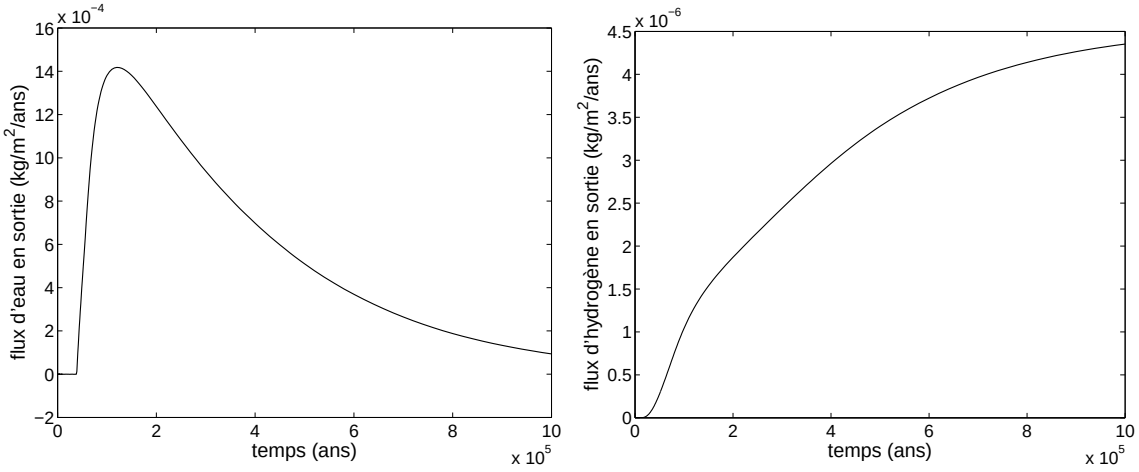


FIGURE 7.11 – cas test 2 : indicateurs en sortie

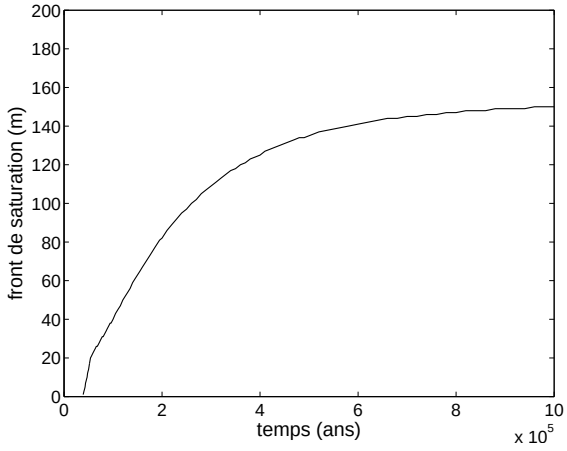


FIGURE 7.12 – cas test 2 : position du front de saturation

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

7.2.3 Cas test 3 : conditions initiales hors équilibre

Ce dernier cas test se distingue des deux précédents. On y considère un milieu poreux homogène "isolé", c'est-à-dire avec des conditions de flux nuls sur toute la frontière du domaine. Le système évolue ainsi de son état initial vers un état d'équilibre. La particularité de ce cas test réside donc dans l'état initial du système.

On sait que, de part l'équilibre mécanique local du milieu poreux, les pressions du liquide et du gaz doivent être continues (voir la section 5.2.3). On s'intéresse ici au retour vers cet équilibre mécanique pour un système partant de conditions initiales hors équilibre, c'est-à-dire ne respectant pas la continuité des pressions. Plus précisément, on prendra comme conditions initiales un état saturé en eau et saturé en hydrogène dissout ($p_g = p_l$) sur Ω_1 et un état insaturé sur Ω_2, la pression du liquide étant la même sur les deux sous domaines. Les données complètes de ce cas test sont indiquées dans le tableau 7.4.

Conditions limites et Conditions initiales	Milieu poreux		Autre	
	Param.	Valeur sur Ω	Param.	Valeur
$\phi^w \cdot \nu = 0$ sur $\partial\Omega$	k	10^{-18} m^2	L_x	1 m
$\phi^h \cdot \nu = 0$ sur $\partial\Omega$	Φ	0.3 $(-)$	L_y	0.1 m
$p_l(t=0) = p_{l,1}$ sur Ω_1	P_r	$2\ 10^6$ Pa	L_1	0.5 m
$p_g(t=0) = p_{g,1}$ sur Ω_1	n	1.54 $(-)$	$p_{l,1}$	10^6 Pa
$p_l(t=0) = p_{l,2}$ sur Ω_2	$S_{l,res}$	0.01 $(-)$	$p_{g,1}$	10^6 Pa
$p_l(t=0) = p_{l,2}$ sur Ω_2	$S_{g,res}$	0 $(-)$	$p_{l,2}$	10^6 Pa
			$p_{g,2}$	$2.5\ 10^6$ Pa

TABLE 7.4 – Données du cas test 3 : conditions limites et initiales, caractéristiques du milieu poreux et géométrie

Résultats numériques : présentation

La simulation de ce cas test a été effectuée sur une durée allant de $t = 0$ ans à $t = T_{fin} = 10^6$ s ($T_{fin} \approx 11.6$ $jours$) ; le pas d'espace a été pris constant égal à $2\ 10^{-3}$ m et le pas de temps variable, allant de 0.33 s en début de simulation à $16.7\ 10^3$ s en fin de simulation. La figure 7.13 représentent les profils, en différents temps, de la pression du liquide, p_l, de la concentration d'hydrogène dissout, $\frac{\rho_g^{std}}{M^h} R_s$, et de la saturation en gaz, S_g. Les figures 7.14, 7.15 et 7.16 présentent l'évolution en temps de différents indicateurs : pressions des phases, p_l et R_s/C_h (voir la remarque 4), et saturation en gaz, S_g, en entrée, Γ_{in}, sur la figure 7.14 et en sortie, Γ_{out}, sur la figure 7.15 ; position du front de saturation sur la figure 7.16.

On distingue essentiellement deux phases au cours de la simulation :

– Pour $0\ s < t < 1.92\ 10^5\ s$, le front de saturation initialement situé en $x = 0.5\ m$ se déplace vers l'abscisse $x = 0\ m$ pour atteindre l'entrée, Γ_{in}, au temps $t = 1.92\ 10^5\ s$ (cf figure 7.16). Le déplacement de ce front se retrouve sur les profils de saturation de la figure 7.13 et l'on peut voir en outre que le saut de saturation en gaz au niveau du front de saturation qui est introduit par les conditions initiales (environ 16 % à $t = 0\ s$) diminue au cours du temps jusqu'à environ 3 % quand le front atteint la frontière Γ_{in}. La position du front de saturation se lit aussi sur les profils de la pression du liquide et de la concentration d'hydrogène dissout de la figure 7.13 : pour la concentration d'hydrogène, on observe un saut à la position du front tandis que pour la pression du liquide il s'agit d'une rupture de pente. Durant toute cette phase où une zone saturée en eau ($S_g = 0$) existe, les valeurs de la pression du liquide et de la concentration d'hydrogène sont spatialement uniformes dans la zone saturée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

en eau. Si la concentration d'hydrogène reste constante et égale à sa valeur initiale dans la zone saturée, ce n'est pas le cas de la pression liquide qui commence par croître très rapidement ($p_l(t = 10^3\ s) \approx 1.6\,10^6\ Pa$), puis plus doucement jusqu'à $t = 1.3\,10^5\ s$ où elle se met à diminuer légèrement (cf figure 7.14)

– Pour $1.92\,10^5\ s < t < 10^6\ s = T_{fin}$, tout le domaine est insaturé ($S_g > 0$). Les profils de la pression du liquide, de la concentration d'hydrogène et de la saturation sont tous trois strictement monotones et continus et évoluent tous vers une répartition spatialement uniforme (cf figure 7.13).

Résultats numériques : analyse

Comme prévu, le système initialement déséquilibré (déséquilibre mécanique dû à la discontinuité de la pression du gaz) évolue vers un état d'équilibre stationnaire, ici uniforme du fait de l'absence d'injection/aspiration de matière. En toute rigueur, le retour à l'équilibre mécanique a lieu "instantanément", la pression du liquide et la concentration d'hydrogène dissout étant toutes deux continues pour $t > 0\ s$. Cependant, la concentration d'hydrogène continue de présenter un gradient localement très fort jusqu'à $t = 1.9210^5\ ans$ et l'on continuera donc à parler ici de déséquilibre.

Dans un premier temps, ou plus précisément sur une échelle de temps plus rapide (de l'ordre de $10^2\ s$), seule la pression du liquide dans la zone saturée évolue. Ceci est dû d'une part au déséquilibre initial, la pression du gaz étant plus grande dans la zone insaturée que dans la zone saturée, et d'autre part à la condition de flux nul en eau imposée en Γ_{in}. Il résulte de ces deux points que l'eau de la zone saturée est "comprimée" par le gaz de la zone insaturée. Le gradient de pression liquide qui apparait autour du front de saturation permet alors au liquide de s'écouler de la zone saturée vers la zone insaturée, entrainant ainsi le déplacement du front de saturation.

On peut expliquer la persistance d'un fort gradient de la concentration d'hydrogène au niveau du front de saturation par l'antagonisme des flux de diffusion et de convection de l'hydrogène dissout à cet endroit. D'une part le mécanisme de diffusion est censé atténuer au fil du temps le contraste de concentration d'hydrogène en créant un flux allant de la zone insaturée, de forte concentration, vers la zone saturée, de faible concentration. D'autre part, on a vu que l'écoulement du liquide s'établit en sens inverse, le flux d'hydrogène dissout dû à la convection venant ainsi amoindrir l'effet régularisant de la diffusion.

Une fois le déséquilibre mécanique disparu, la système tend vers un état stationnaire. Le système étant isolé, cet état est spatialement uniforme et peut être déterminé, du fait de la conservation de la masse de chaque composant, par la masse de chaque composant présente à l'état initial.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

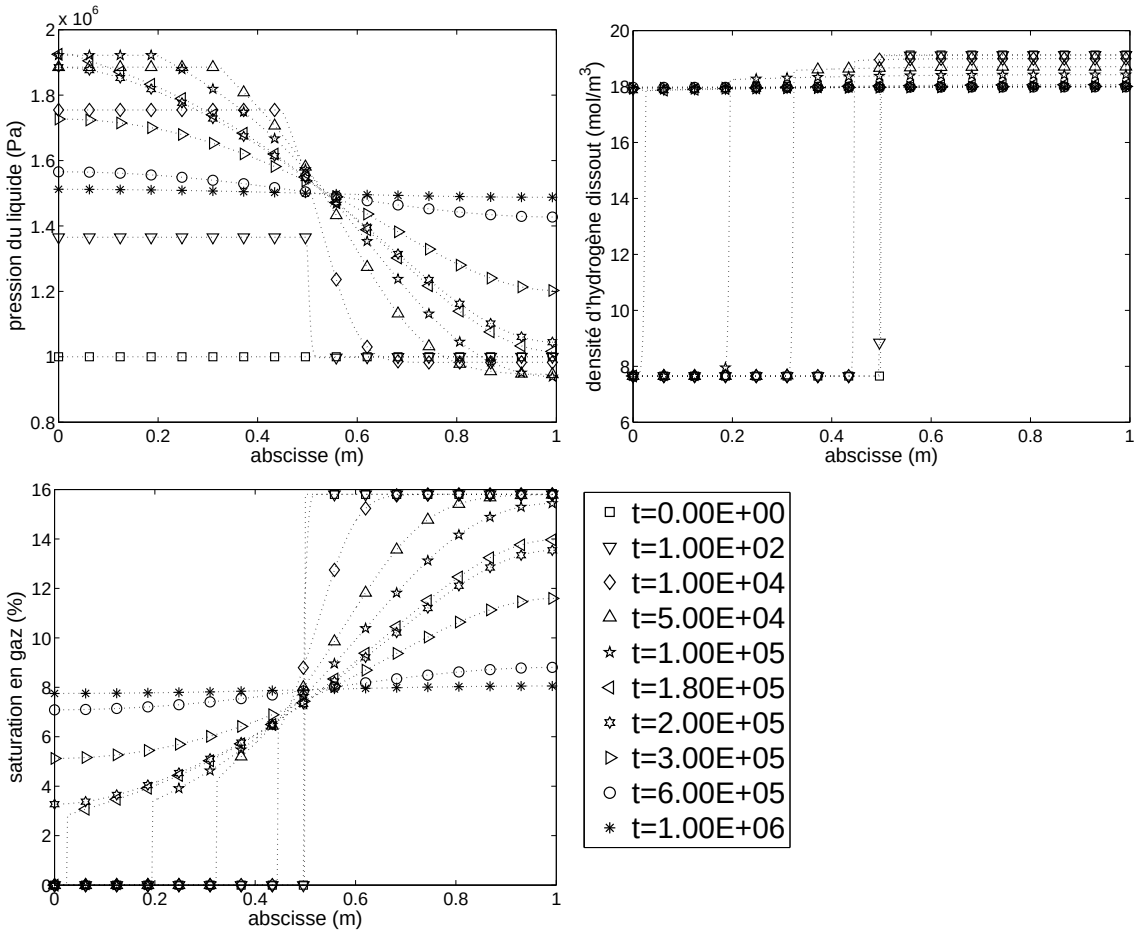


FIGURE 7.13 – cas test 3

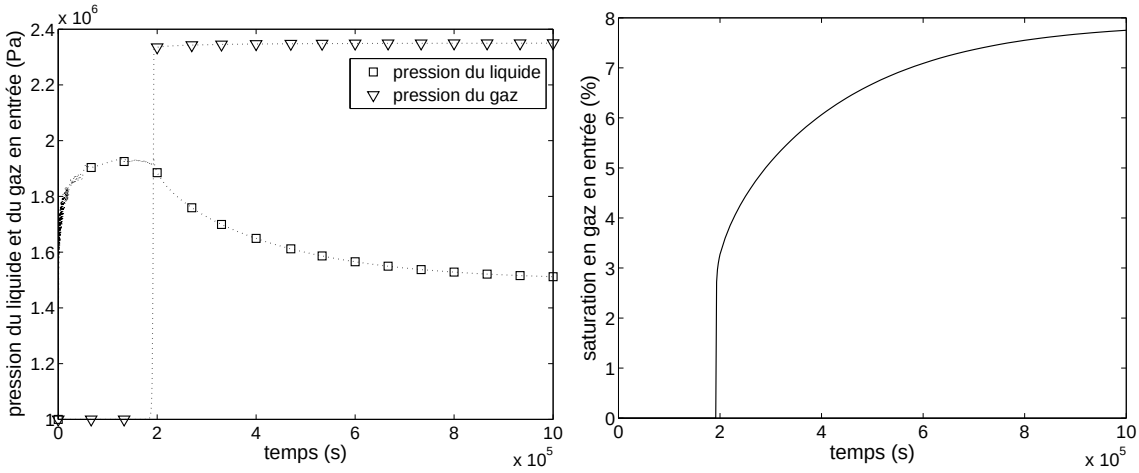


FIGURE 7.14 – cas test 3 : indicateurs en entrée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

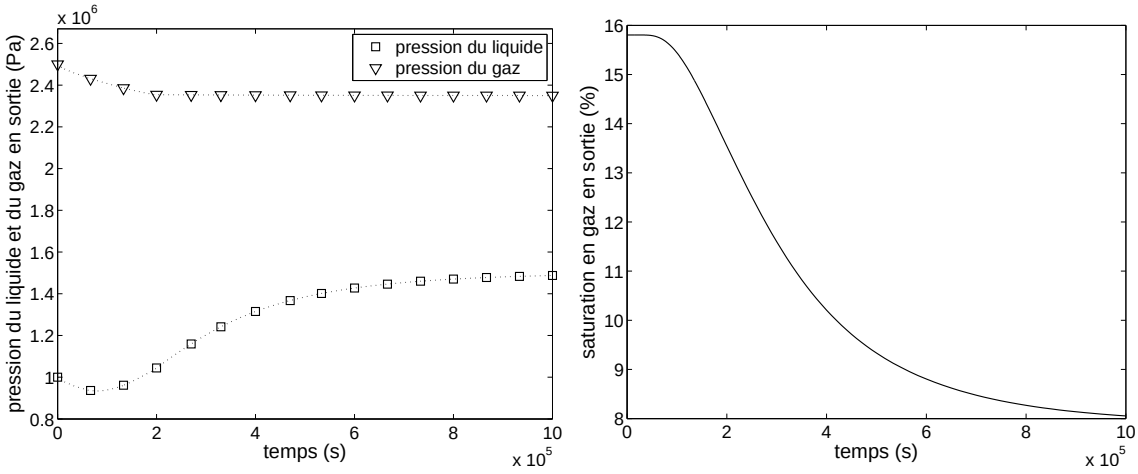


FIGURE 7.15 – cas test 3 : indicateurs en sortie

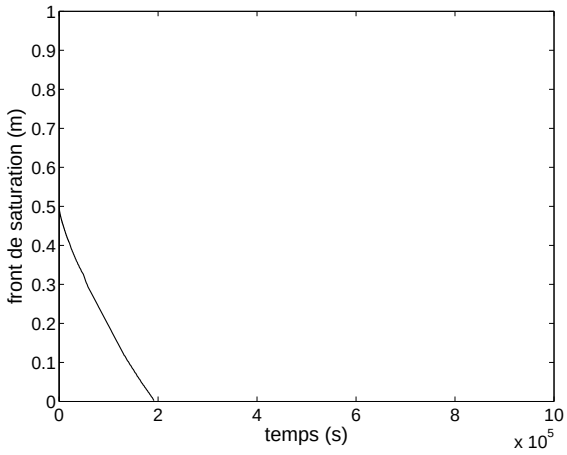


FIGURE 7.16 – cas test 3 : position du front de saturation

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 8

Couplex-Gaz

DANS le chapitre 7 nous avons présenté la mise en œuvre de notre modèle d'écoulement d'un mélange diphasique de type eau/hydrogène en milieux poreux ainsi que les résultats de simulation d'une série de cas test élémentaires. Dans ce chapitre, on s'intéresse désormais à une simulation plus réaliste : le cas test "Couplex-Gaz 1" (voir [AND]) proposé par l'ANDRA.

L'objectif de ce cas test est de simuler la dynamique de resaturation d'une alvéole de déchets de moyenne activité à vie longue (appelés déchets B) depuis la fermeture de l'alvéole jusqu'à la fin de la période de production de gaz. La géométrie de cet exercice est bi-dimensionnelle et présente une forte disparité dans les échelles de longueurs, celles-ci allant du dixième de mètres à la centaine de mètres. On y retrouve de plus les difficultés abordées dans les cas test du chapitre précédent : forts contrastes de roches et conditions initiales hors équilibre.

8.1 Définition de l'exercice

8.1.1 Géométrie

La géométrie du problème est représentée en figure 8.1 et les valeurs des paramètres géométriques sont données dans le tableau 8.1 (page 109).

Le domaine considéré est une coupe verticale rectangulaire,

$$\mathcal{D} = [0, 2L_x] \times [0, L_z]$$

A grande échelle, on peut distinguer deux zones : la zone rocheuse qui constitue l'essentiel du domaine et la zone ouvragée qui est incluse au centre de la zone rocheuse. La zone rocheuse est constituée de trois matériaux adjacents : le Callovo-Oxfordien (COX en abrégé), la zone endommagée et la zone fracturée. La zone ouvragée est constituée de quatre matériaux : le béton de remplissage, le jeu, le béton de colis et le colis primaire.

8.1.2 Paramètres physiques

On conserve les notations des chapitres précédents pour décrire l'écoulement du mélange eau/hydrogène (voir le système (5.5)-(5.6)).

L'accélération de la gravité est donnée par

$$\mathbf{g} = -g\nabla z$$

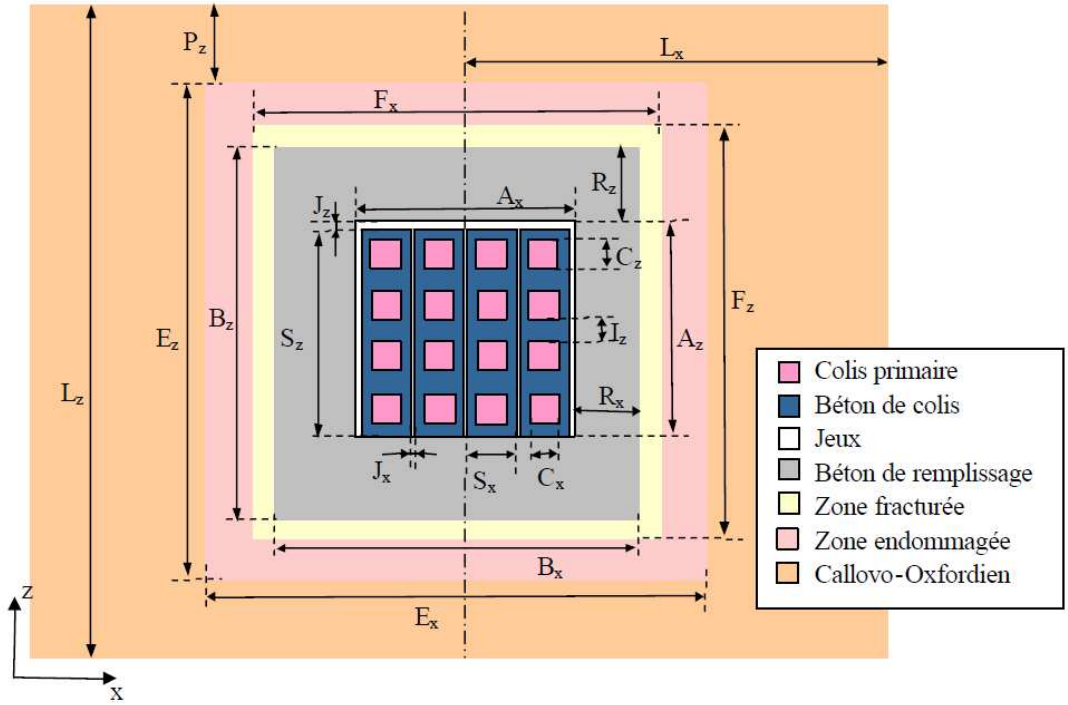


FIGURE 8.1 – Géométrie de l'exercice Couplex-Gaz (source ANDRA)

où $g = 9.81\ m/s^2$. Les fonctions de perméabilité relative et la loi de pression capillaire sont données par le modèle de van Genuchten-Mualem et s'expriment ainsi :

$$\begin{cases} p_c = P_r \left(S_{le}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n} , \\ kr_l = \sqrt{S_{le}} \left(1 - (1 - S_{le}^{1/m})^m \right)^2 \\ \text{et} \quad kr_g = \sqrt{1 - S_{le}} \left(1 - S_{le}^{1/m} \right)^{2m} \\ \text{avec} \quad S_{le} = \dfrac{S_l - S_{l,res}}{1 - S_{l,res} - S_{g,res}} \quad \text{et} \quad m = 1 - \dfrac{1}{n} \end{cases}$$

Les caractéristiques spécifiques aux fluides et aux composants sont données dans la tableau 8.2 et celles relatives aux différents matériaux du milieu poreux sont données dans le tableau 8.3. Ici, le tenseur de perméabilité absolue, $\mathbb{K}$, est toujours diagonal dans la base canonique $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)$ et donné par

$$\mathbb{K} = \begin{bmatrix} k_h & 0 \\ 0 & k_v \end{bmatrix}_{(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Param.	Valeur (en m)	Param.	Valeur (en m)
L_x	100	C_z	1.9
L_z	130	J_x	0.1
E_x	20	J_z	0.2
E_z	20	A_x	8.5
B_x	12	A_z	8.6
B_z	12	F_x	13
S_x	2	F_z	13
S_z	8.4	I_z	0.2
C_x	1.8	P_z	55
R_z	1.7	R_x	1.75

TABLE 8.1 – Valeurs des paramètres géométriques de l'exercice Couplex-Gaz

Paramètre	Valeur	
θ	303	K
D_l^h	$3\ 10^{-9}$	m^2/s
μ_l	$1\ 10^{-3}$	$Pa.s$
μ_g	$9\ 10^{-6}$	$Pa.s$
$H(\theta = 303K)$	$7.65\ 10^{-6}$	$mol/Pa/m^3$
M^w	10^{-2}	kg/mol
M^h	$2\ 10^{-3}$	kg/mol
ρ_l^{std}	10^3	kg/m^3
ρ_g^{std}	$8\ 10^{-2}$	kg/m^3

TABLE 8.2 – Valeurs des caractéristiques des fluides et des composants

Param.	Matériaux						
	Colis	Béton de colis	Jeux	Béton de rempl.	Zone fract.	Zone endo.	COX
k_v (m^2)	10^{-15}	10^{-19}	10^{-12}	10^{-18}	$5\ 10^{-16}$	$5\ 10^{-18}$	$5\ 10^{-21}$
k_h (m^2)	$k_h = k_v$						$5\ 10^{-20}$
Φ (%)	25	15	100	30	16	15	15
P_r (Pa)	$3\ 10^4$	$2\ 10^6$	$5\ 10^4$	$2\ 10^6$	$2\ 10^6$	$5\ 10^6$	$15\ 10^6$
n $(-)$	1.5	1.54	1.5	1.54	1.5	1.5	1.49
$S_{l,res}$ (%)	1	1	1	1	10	20	40
$S_{g,res}$ (%)	0	0	0	0	0	0	0

TABLE 8.3 – Valeurs des caractéristiques du milieu poreux selon le matériau

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

8.1.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites du problème sont les suivantes :
– Sur le haut du domaine ($z = 130\ m$)

$$p_l = p_{top} \quad \text{et} \quad R_s = 0 \quad \text{pour tout } t$$

– Sur le bas du domaine ($z = 0\ m$)

$$p_l = p_{bot} \quad \text{et} \quad R_s = 0 \quad \text{pour tout } t$$

– Sur les bords latéraux du domaine ($x = 0\ m$ et $x = 200\ m$)

$$\phi_w \cdot \nu = 0\ kg/m^2/an \quad \text{et} \quad \phi_g \cdot \nu = 0\ kg/m^2/an \quad \text{pour tout } t$$

Avec $p_{bot} = 4.2\,10^6\ Pa$, $p_{top} = 5.5\,10^6\ Pa$ et ν la normale unitaire sortante du domaine.

8.1.4 Conditions initiales

Les conditions initiales du problème sont les suivantes :
– Dans la zone rocheuse (COX + zone endommagée + zone fracturée),

$$R_s = 0 \quad \text{et} \quad p_l = p_{bot} + (p_{top} - p_{bot})\frac{z}{L_z}$$

– Dans le béton de remplissage,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.3$$

– Dans le jeu,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.9$$

– Dans le béton de colis,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.4$$

– Dans le colis primaire,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.8$$

8.1.5 Seconds membres

Notons B_{colis} la partie du domaine $\mathcal{D}$ correspondant aux colis primaires (voir la figure 8.1). Les termes de sources volumiques sont donnés, pour $t > 0$ et $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, par

$$\mathcal{F}^w(t,\mathbf{x}) = 0\ kg/m^3/an \quad \text{et}$$
$$\mathcal{F}^h(t,\mathbf{x}) = \frac{M^h}{|B_{colis}|}\left(Q^{h,1}\mathbb{1}_{[0,T_1]}(t) + Q^{h,2}\mathbb{1}_{[T_1,T_2]}(t)\right)\mathbb{1}_{B_{colis}}(\mathbf{x})$$

Avec M^h la masse molaire de l'hydrogène (voir tableau 8.2), $|B_{colis}|$ la mesure de B_{colis} et

$$Q^{h,1} = 100\ mol/an/m\ ,\ Q^{h,2} = 8\ mol/an/m\ ,$$
$$T_1 = 500\ ans \quad \text{et} \quad T_2 = 10^4\ ans$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

8.1.6 Sorties demandées

Les sorties demandées pour cet exercice sont de quatre types.

- Flux d'hydrogène sortant :
  On regardera l'évolution temporelle des flux d'hydrogène à travers : le haut du domaine (frontière définie par $z = 130\ m$ et que l'on notera Γ_{top}), le bas du domaine (frontière définie par $z = 0\ m$ et que l'on notera Γ_{bot}) et la frontière entre la zone ouvragée et la zone rocheuse (frontière définie comme l'interface entre le béton de remplissage et la zone zone fracturée, et que l'on notera Γ_{ouv}).
- Position du front de saturation :
  On regardera l'évolution temporelle de la position du front de saturation sur la demi-droite $z = 65\ m$ et $x > 100\ m$.
- Trace des observables :
  On regardera l'évolution temporelle des pressions liquide et gazeuse et de la saturation aux points (les coordonnées sont données en mètres) : $A\,(101, 62)$, $B\,(101, 64.9)$, $C\,(101, 69.2)$, $D\,(101, 70)$, $E\,(101, 71.3)$, $F\,(101, 73)$ et $G\,(101, 77)$. On notera que ces points sont alignés verticalement, qu'ils sont situés dans, ou au voisinage, de la zone de stockage et que chacun se trouve dans un matériau différent : colis primaire pour A, béton de colis pour B, jeu pour C, béton de remplissage pour D, zone fracturée pour E, zone endommagée pour F et COX pour G.
- Profil des observables :
  On regardera les profils des pressions liquide et gazeuse et de la saturation le long de la droite $x = 103\,m$ pour les temps : $t_{obs,0} = 0\,ans$, $t_{obs,1} = 250\,ans$, $t_{obs,2} = 500\,ans$, $t_{obs,3} = 1000\ ans$, $t_{obs,4} = 5000\ ans$, $t_{obs,5} = 7500\ ans$, $t_{obs,6} = 10000\ ans$, $t_{obs,7} = 20000\ ans$, $t_{obs,8} = 40000\ ans$, $t_{obs,9} = 50000\ ans$ et $t_{obs,10} = t_{final}$, le temps final de la simulation.

8.1.7 Comparaison entre le modèle proposé et le modèle utilisé

Il est à noter que le modèle physique que nous utilisons diffère légèrement de celui proposé initialement dans l'exercice. Ces différences concernent en particulier les points suivants :

- La prise en compte de l'effet du milieu poreux sur le phénomène de diffusion via la notion de tortuosité. Cet effet a été présenté en section 4.2.4 et nous l'avons négligé par la suite. L'exercice initial propose des valeurs de la tortuosité allant de 1 à 0.25.
- La prise en compte de la vapeur d'eau. On a supposé dans notre modèle (voir section 4.2.7) que la phase gazeuse était uniquement composée d'hydrogène.

Les définitions que l'on donne ici des conditions aux limites et initiales sont elles aussi partiellement différentes de la proposition originale. En effet, si les deux définitions coïncident exactement dans les zones où le mélange fluide est dans un état insaturé (liquide/gaz), les états totalement saturés en liquide (voir l'état initial de la zone rocheuse par exemple) ne sont définis que par la pression liquide dans la proposition originale de l'exercice. Cette donnée est insuffisante pour notre modèle (le liquide contenant une certaine concentration d'hydrogène dissout à préciser), nous avons choisi de la compléter en supposant que le liquide était pur dans les zones saturées. Cette hypothèse de modélisation d'un site de stockage est consistante avec l'idée que l'hydrogène est produit par le stockage mais absent du milieu "naturel".

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

8.2 Résultats numériques

La simulation de cet exercice a été effectuée à l'aide du modèle présenté au chapitre 5, l'implémentation de ce modèle étant décrite au chapitre 7. La simulation se déroule sur une durée allant de $t = 0\ an$ à $t = t_{final} = 53000\ ans$, moment où le stockage est très largement resaturé en liquide. Le maillage utilisé présente des pas d'espace allant de $0.05 m$ dans la zone de stockage à $8\ m$ dans les zones les plus éloignées du stockage ; le pas de temps utilisé varie de $10^{-3}\ ans$ à $200\ ans$.

Les figures 8.2 à 8.7 représentent les différents indicateurs spécifiés en section 8.1.6 : la position du front de saturation en figure 8.2, les flux d'hydrogène sortant en figure 8.3, la trace des observables en différents points d'observation en figure 8.4 et les profils des observables en différents temps d'observation en figures 8.5, 8.6 et 8.7.

Il est à noter que dans toutes ces figures où il est fait mention de la pression du gaz, il s'agit en toute rigueur de la *pression d'équilibre thermodynamique du gaz* telle qu'elle est définie dans la remarque 4 (voir page 91). On rappelle que la *pression d'équilibre thermodynamique du gaz* est une quantité qui est proportionnelle à la concentration d'hydrogène dissout dans le liquide et qui correspond exactement à la pression de la phase gazeuse quand cette dernière existe.

Analyse des résultats

Tout d'abord, on retrouve sur les figures 8.2, 8.3 et 8.4 le temps d'arrêt de la source d'hydrogène ($T_2 = 10^4\ ans$). Celui-ci se traduit : par un maximum pour la pression de chaque phase aux points d'observation (tous proches de la source), par un pic des flux d'hydrogène sortant (avec un retard pour les frontières Γ_{top} et Γ_{bot} qui sont éloignées de la source) et par une inversion de la progression du front de saturation. Le temps intermédiaire, $T_1 = 500\ ans$, se retrouve quant à lui dans la rupture de l'évolution du flux à travers Γ_{ouv} et des pressions aux points d'observation.

L'évolution du système dans les premiers temps de la simulation consiste en un retour à l'équilibre mécanique du système. Les conditions initiales dans la zone ouvragée, via les discontinuités de la pression du liquide (voir le temps $t = 0\ an$ sur la figure 8.5), sont en effet hors équilibre. On observe donc une première phase durant laquelle la pression du liquide se "régularise". Ceci se traduit par une uniformisation des valeurs de la pression du liquide aux points d'observation sur la figure 8.4. A partir de cette figure, on peut estimer que l'équilibre est rétabli à partir du temps $T_{eq} \approx 200$ ou $300 ans$. Les profils de la pression du liquide aux $t = 0\ an$, $t = 250\ ans$ et $t = 500\ ans$ (voir la figure 8.5) viennent confirmer ce point. Durant la période $[0\ an; T_{eq}]$, on observe de plus, sur la figure 8.2, une évolution "rapide" du front de saturation : celui-ci avance jusqu'à $30\ m$ en $t \approx 60\ ans$ pour revenir autour de $17\ m$ à $t \approx 150\ ans$.

Considérons la période de production de l'hydrogène une fois l'équilibre rétabli : $t \in [T_{eq}; T_2]$). On observe que la saturation en gaz varie peu, que ce soit dans la zone rocheuse ou la zone ouvragée (voir les figures 8.4 et 8.7). Le front de saturation progresse malgré tout dans le COX pour s'éloigner à plus de $50\ m$ en $t = T_2$, les valeurs de la saturation en gaz dans le COX restant très faible (sur la figure 8.4, le maximum au point G est atteint en $t = T_2$ pour une valeur inférieure à $6\ 10^{-3}$). Durant toute cette période, la pression du liquide et la pression du gaz augmentent dans le stockage (voir les figures 8.4, 8.5 et 8.6).

Après l'arrêt de la production d'hydrogène, c'est-à-dire durant la période $[T_2; T_{final}]$ (avec $t_{final} = 53000\ ans$), on observe la resaturation en liquide du stockage. Ceci se traduit par une chute de la saturation en gaz aux points d'observation (figure 8.4) et par un recul du front de saturation (figure 8.2) qui atteint zéro sur la demi-droite $z = 65\ m$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

et $x > 100\,m$ en $t \approx 50000\,ans$. On constate sur la figure 8.7 que la resaturation des colis se fait du bas vers le haut ; en $t = t_{final}$ les colis sont entièrement saturés de liquide et seul le jeu en haut du stockage contient encore du gaz (saturation en gaz de l'ordre de $5\ 10^{-2}$). Durant cette période, la pression du liquide dans tout le domaine (voir la figure 8.5) tend vers la répartition affine de la pression hydrostatique. La pression du gaz (*pression d'équilibre thermodynamique du gaz*) montre quant à elle la répartition spatiale de l'hydrogène (voir la figure 8.6) : diffus dans toute la zone rocheuse sous forme dissoute, l'hydrogène se concentre, sous forme gazeuse, dans le haut du stockage (dans les colis et le jeu en $t = 50000\,ans$, uniquement dans le jeu en $t = 53000\,ans$).

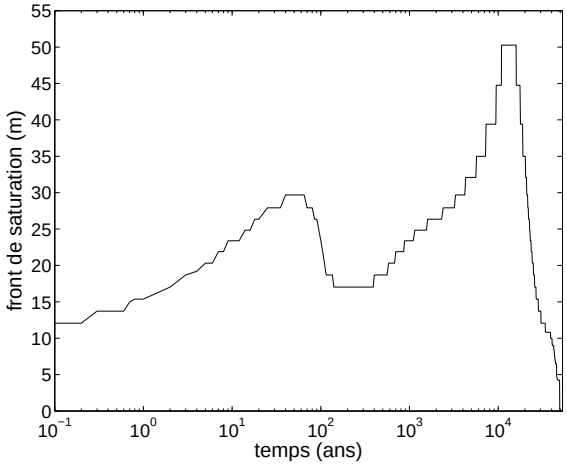


FIGURE 8.2 – Évolution temporelle de la position du front de saturation le long de la demi-droite $z = 65\,m$ et $x > 100\,m$. La longueur indiquée correspond à la distance entre le front et l'origine de la demi-droite ($x = 100\,m, z = 65\,m$).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

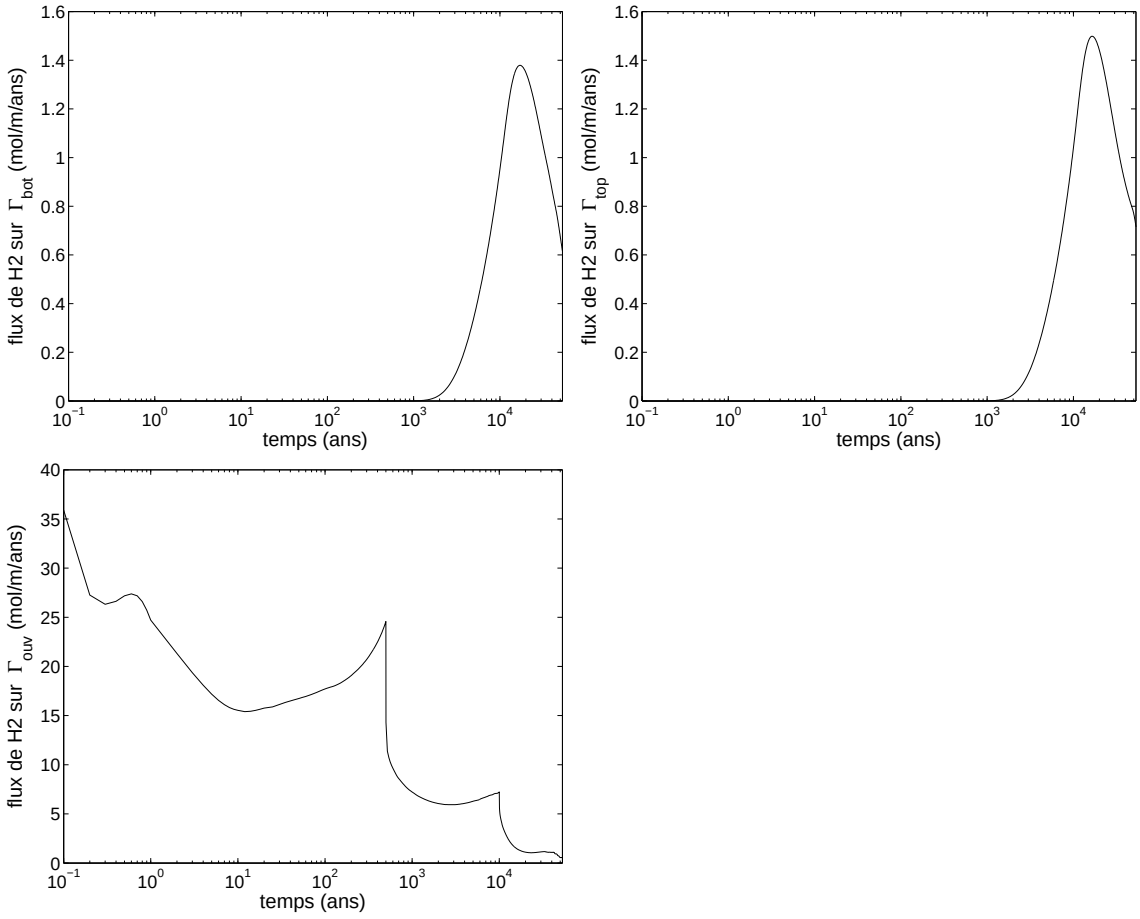


FIGURE 8.3 – Évolution temporelle des flux d'hydrogène à travers : le haut du domaine (Γ_{top}, figure en haut à droite) ; le bas du domaine (Γ_{bot}, figure en haut à gauche), le haut du domaine (Γ_{top}, figure en haut à droite) et l'interface entre les zones ouvragée et rocheuse (Γ_{ouv}, figure du bas).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

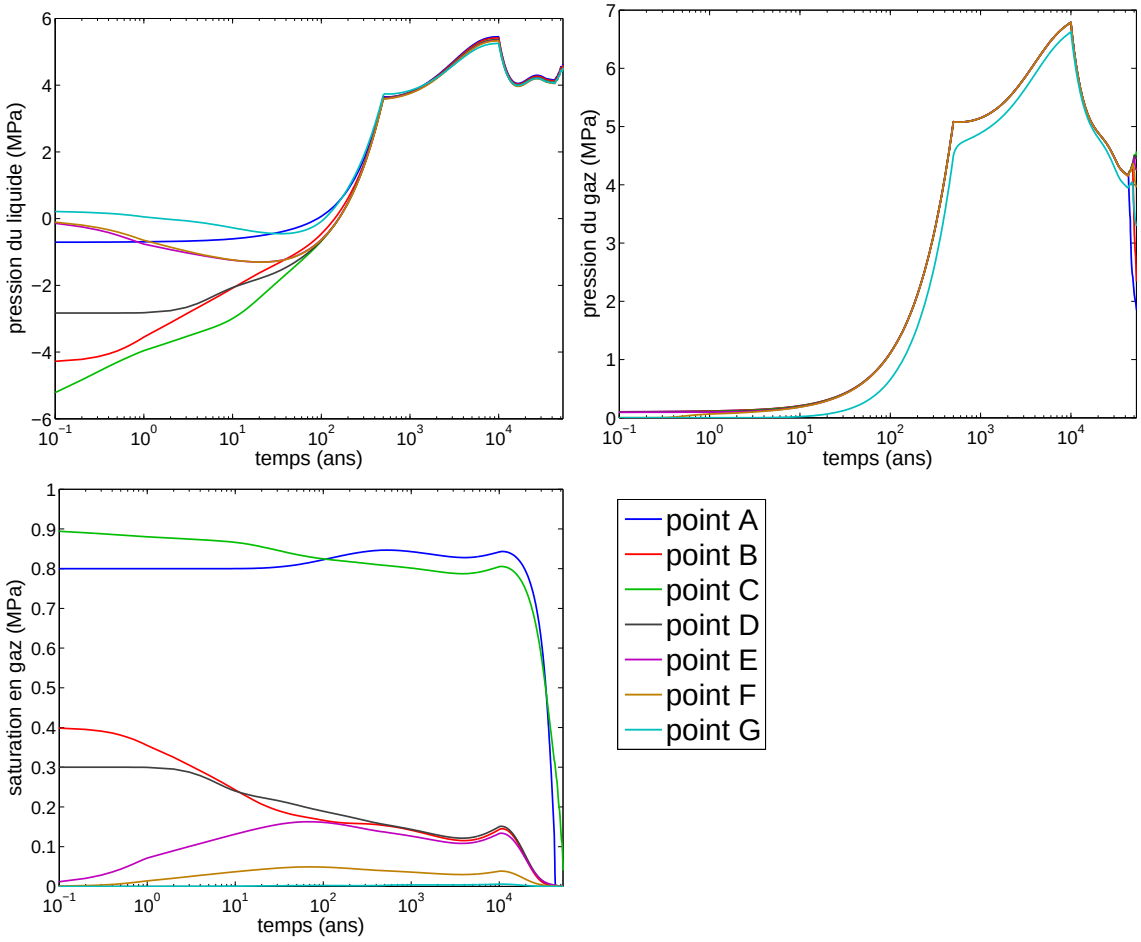


FIGURE 8.4 – Évolution temporelle de la pression du liquide (en haut à gauche), de la pression du gaz (en haut à droite) et de la saturation en gaz (en bas à gauche) aux différents points d'observation.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

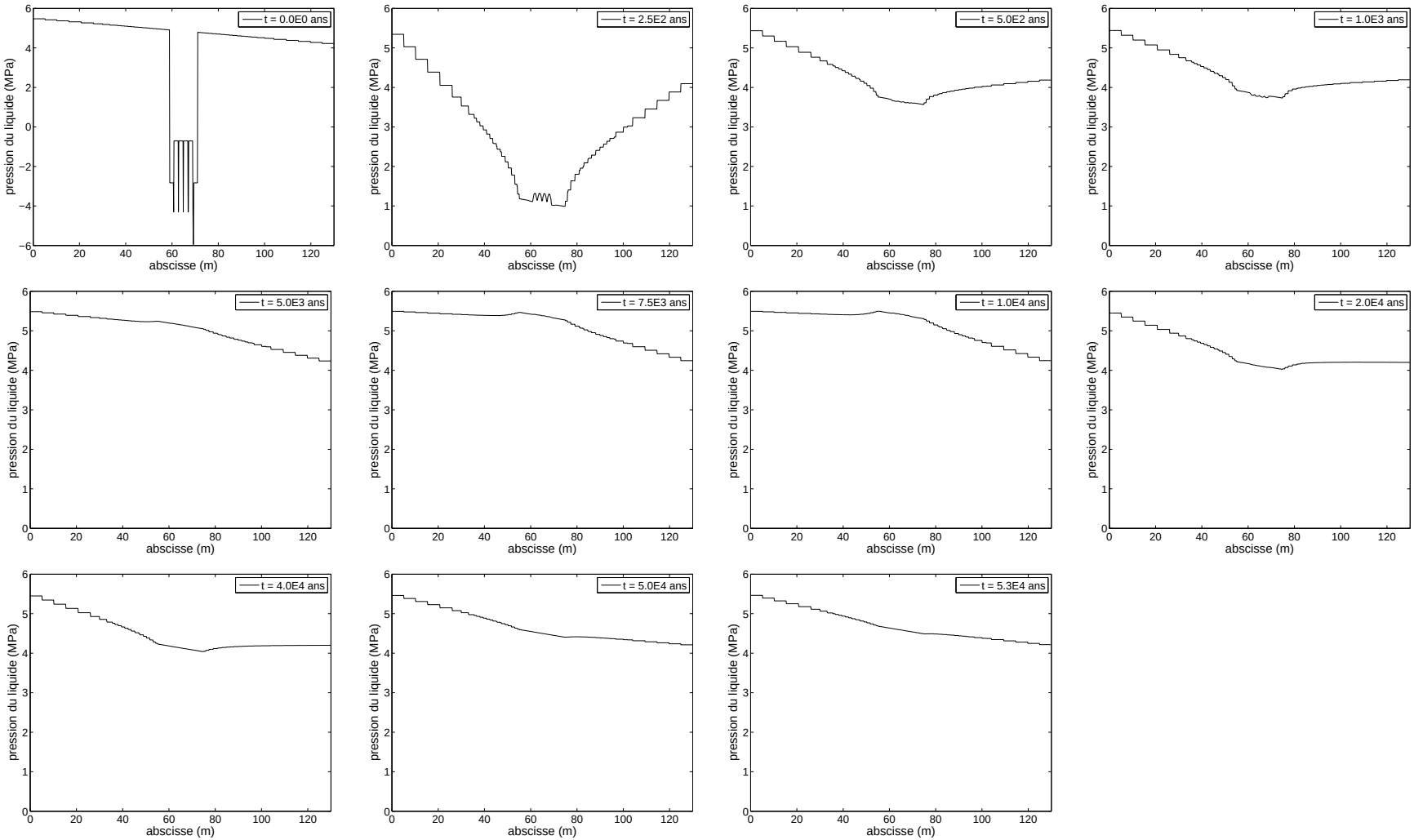


FIGURE 8.5 – Profils de la pression du liquide en $x = 103\,m$ aux différents temps d'observation. L'abscisse $0\,m$ correspond au bas du domaine ($z = 0\,m$) et l'abscisse $130\,m$ correspond au haut du domaine ($z = 130\,m$).

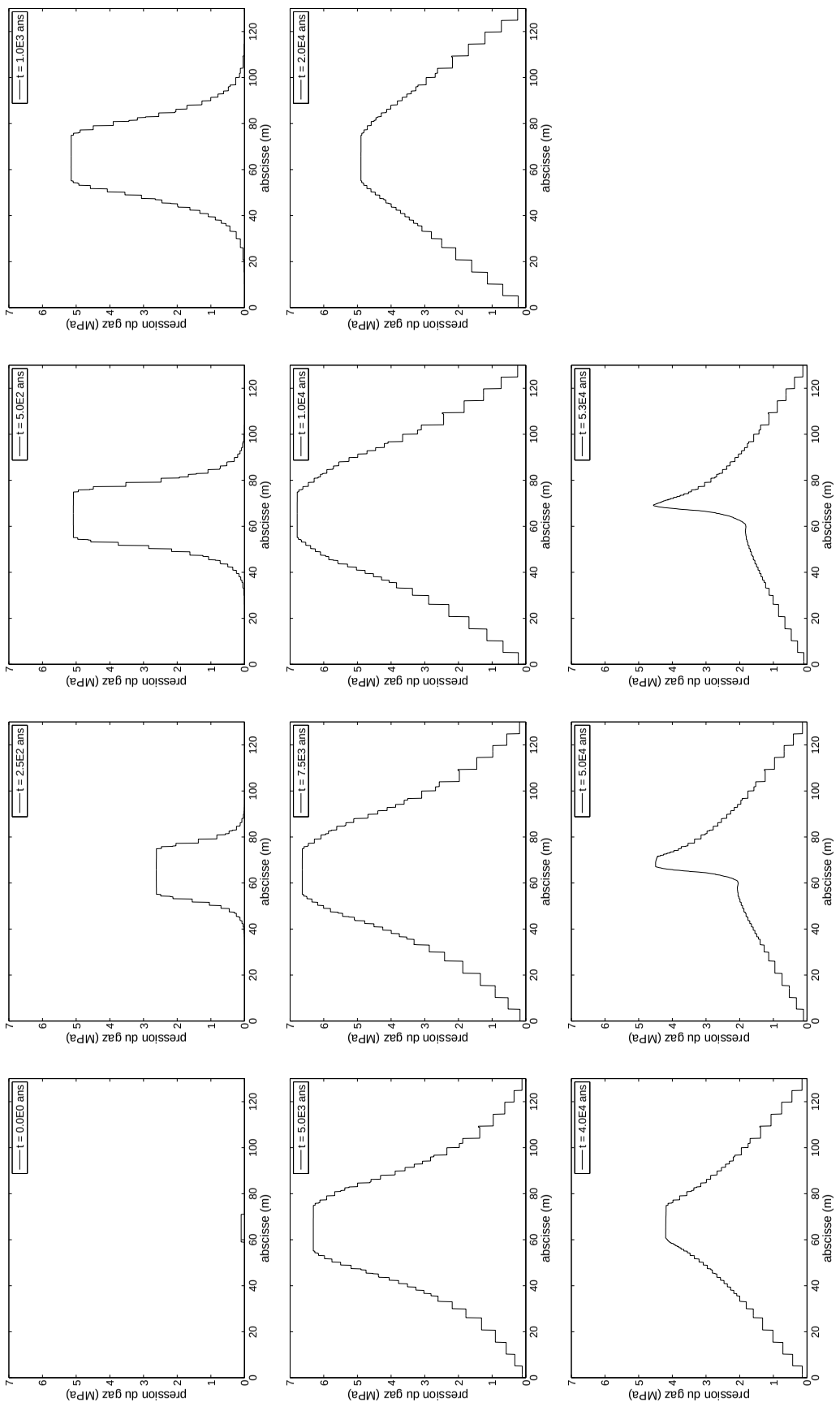


FIGURE 8.6 – Profils de la pression du gaz en $x = 103\,m$ aux différents temps d'observation. L'abscisse $0\,m$ correspond au bas du domaine ($z = 0\,m$) et l'abscisse $130\,m$ correspond au haut du domaine ($z = 130\,m$).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

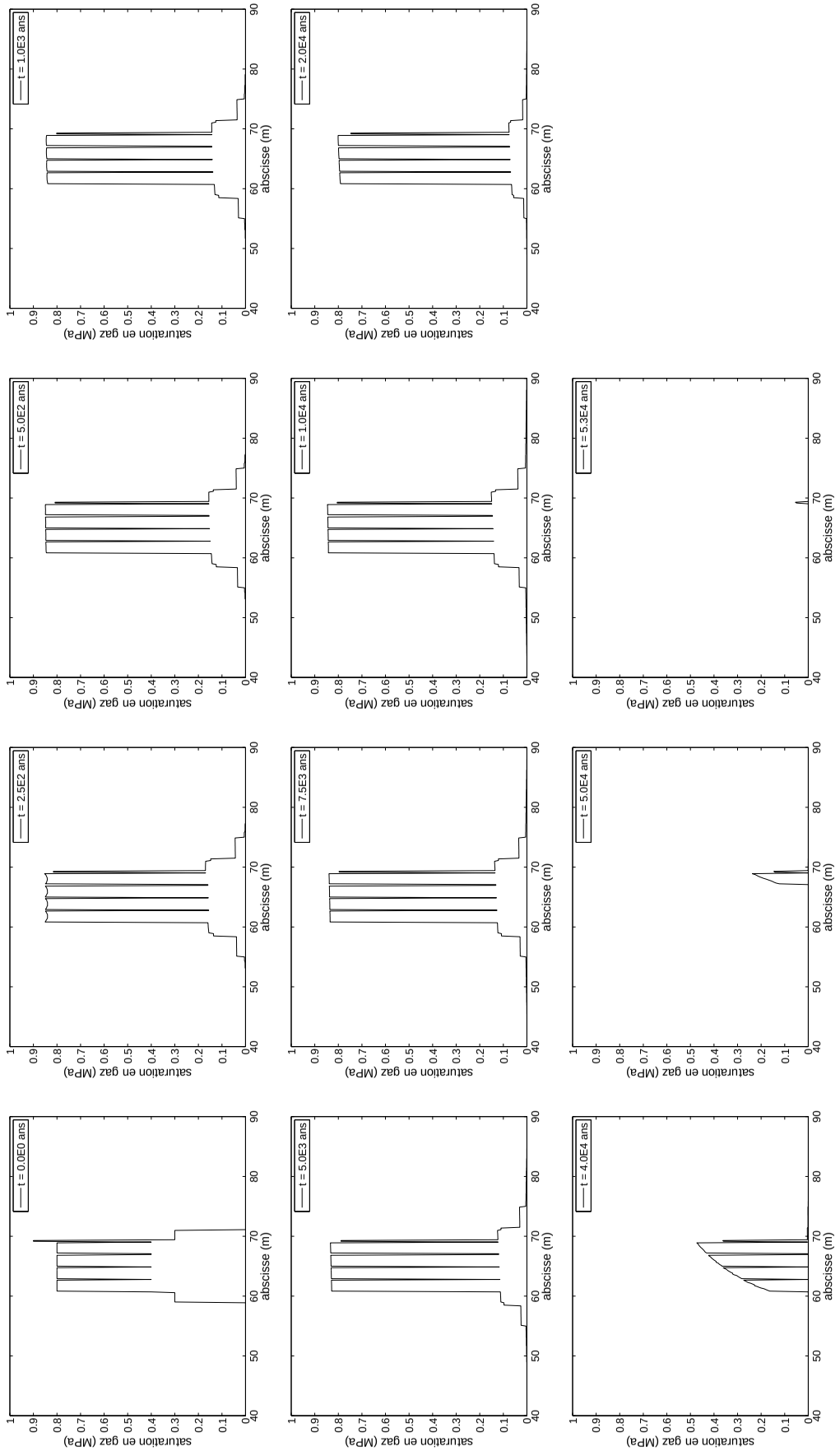


FIGURE 8.7 – Profils de la saturation en gaz en $x = 103\,m$ aux différents temps d'observation. L'abscisse $0\,m$ correspond au bas du domaine ($z = 0\,m$) et l'abscisse $130\,m$ correspond au haut du domaine ($z = 130\,m$).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Chapitre 9

Homogénéisation

La géométrie d'un site de stockage géologique de déchets radioactifs présente généralement deux particularités notables. La première est la grande disparité des échelles caractéristiques de longueur, celles-ci pouvant aller du kilomètre pour le site complet au mètre pour le colis primaire ; la seconde, indissociable de la première, est la forte périodicité de la structure à chaque échelle. Si le premier point constitue, de part les ressources de calcul nécessaires, une difficulté majeure pour la simulation des écoulements à l'échelle du site complet, le second point offre pourtant une voie pour y parvenir via l'homogénéisation du modèle.

En effet, du fait de cette géométrie périodique à plusieurs échelles, il est possible d'obtenir par un processus d'homogénéisation périodique un modèle *effectif* de l'écoulement au niveau de la grande échelle. Ce processus associe à un *matériau composite* (qui présente une périodicité dans ses caractéristiques à petite échelle) un *matériau homogène* équivalent, faisant ainsi disparaître la petite échelle. Le coût de la simulation du modèle effectif se trouve alors réduit en conséquence.

Dans ce chapitre, on construit, en s'inspirant de ce qui peut être fait dans [BLP78] et [SP80], un modèle homogénéisé de l'écoulement diphasique eau/hydrogène en milieux poreux pour une géométrie périodique ayant deux échelles, celle de la cellule périodique et celle du domaine tout entier. On montre que ce modèle homogénéisé conserve la structure du modèle original et l'on peut alors définir des représentants effectifs (ou homogénéisés) pour la loi de pression capillaire, les saturations et les perméabilités absolue et relatives. Dans une seconde partie, on illustre numériquement l'intérêt de cette modélisation effective en comparant les simulations du modèle original et du modèle homogénéisé sur une configuration tirée de l'exercice Couplex-Gaz (voir le chapitre 8).

9.1 Construction d'un modèle effectif

On considère le modèle adimensionné et simplifié proposé au chapitre 5 et décrit par les équations (5.21)-(5.23). Comme déjà au chapitre 6.3, pour alléger les notations, on notera p et r à la place de $\tilde{p}$ et $\tilde{r}$ les pressions du liquide et concentration d'hydrogène dissout adimensionnées, définies en (5.14). On fera de même pour la variable de temps et les opérateurs de divergence et de gradient, définis en (5.14) et (5.15), que l'on notera

simplement t, div et ∇. Le modèle peut alors s'écrire ainsi, en introduisant $\bar{\omega} \equiv \omega - 1 > 0$:

$$-\frac{\partial \tilde{\Phi} S_g}{\partial t} - \gamma_1 \mathrm{div}(\tilde{K}_l \nabla p - \beta_2 \tilde{K}_l \mathbf{e}) = \alpha_1 \gamma_2 \frac{\mathcal{F}^w}{\mathcal{F}_0} \tag{9.1}$$

$$\frac{\partial \tilde{\Phi}(1+\bar{\omega} S_g) r}{\partial t} - \gamma_1 \mathrm{div}(r \tilde{K}_l \nabla p + \tilde{A}_h \nabla r - \beta_2 (r \tilde{K}_l + \omega \alpha_1 r^2 \tilde{K}_g)\mathbf{e}) = \gamma_2 \frac{\mathcal{F}^h}{\mathcal{F}_0} \tag{9.2}$$

avec

$$\begin{gathered} S_g = \tilde{f}(r-p,x) \;\; ; \;\; \tilde{K}_l = k_{r,l}(S_g,x)\tilde{\mathbb{K}}(x) \;\; ; \;\; \tilde{A}_h = \tilde{K}_g + \tilde{D}_h \;\; ; \\ \tilde{K}_g = \beta_1 r k_{r,g}(S_g,x)\tilde{\mathbb{K}}(x) \;\; \text{et} \;\; \tilde{D}_h = \alpha_3 \tilde{\Phi}(x)(1-S_g) \end{gathered} \tag{9.3}$$

et où les différents coefficients sont donnés en (5.20). On remarquera que l'on a fait apparaître explicitement dans les relations données en (9.3) la dépendance des différentes grandeurs avec la variable d'espace x.

En suivant les résultats obtenus au chapitre 6 et en vue de simplifier certaines considérations futures, on considérera dans la suite que les tenseurs $\tilde{K}_l$ et $\tilde{A}_h$ sont *uniformément elliptiques*. C'est à dire que l'on suppose qu'il existe deux constantes $C_K > 0$ et $C_A > 0$ telles que, pour toute valeur de p et r, pour tout point x et pour tout vecteur $\xi \in \mathbb{R}^d$, on ait $\tilde{K}_l(x)\xi \cdot \xi \geq C_K$ et $\tilde{A}_h(x)\xi \cdot \xi \geq C_A$.

9.1.1 Introduction de l'échelle rapide

On suppose désormais que les données du problème varient *rapidement* dans l'espace. Plus précisément, pour $\varepsilon > 0$ un petit paramètre, on suppose que les données $\tilde{\Phi}$, $\mathcal{F}^w$, $\mathcal{F}^h$, $\tilde{f}$, $k_{r,l}$, $k_{r,g}$ et $\tilde{\mathbb{K}}$ sont tous εP-périodiques par rapport à la variable d'espace. Ici, P est un parallélépipède de $\mathbb{R}^d$ et d est la dimension de l'espace.

De manière générale, si Q est une des données que l'on considère εP-périodique en x, on la notera $Q^\varepsilon(x)$ de manière à faire apparaître sa dépendance au petit paramètre ε. On définira aussi l'objet $Q(y)$ qui est P-périodique par rapport à y, de sorte que Q^ε peut s'écrire comme

$$Q^\varepsilon(x) = Q(x/\varepsilon)$$

Notons que, par cette construction, seule la période de Q^ε varie avec ε, l'amplitude de Q^ε étant indépendante de ε. En particulier, et contrairement à ce qui a été fait dans la première partie de ce mémoire (voir la section 2.1), les termes sources $\mathcal{F}^{w,\varepsilon}$ et $\mathcal{F}^{h,\varepsilon}$ sont définis sur une cellule de taille constante dans la petite échelle x/ε.

Dans ces conditions, le système (9.1)-(9.2) devient :

$$\partial_t \beta_w^\varepsilon - \mathrm{div}\phi_w^\varepsilon = F_w^\varepsilon \tag{9.4}$$

$$\partial_t \beta_h^\varepsilon - \mathrm{div}\phi_h^\varepsilon = F_h^\varepsilon \tag{9.5}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

avec

$$\begin{cases} S_g^\varepsilon = \tilde{f}(r^\varepsilon - p^\varepsilon, x/\varepsilon) \ ; \\ \beta_w^\varepsilon = -\tilde{\Phi}(x/\varepsilon) S_g^\varepsilon \ ; \\ \beta_h^\varepsilon = \tilde{\Phi}(x/\varepsilon)(1+\bar{\omega} S_g^\varepsilon) r^\varepsilon \ ; \\ \phi_w^\varepsilon = \tilde{K}_l^\varepsilon \nabla p^\varepsilon - \beta_2 \tilde{K}_l^\varepsilon \mathbf{e} \ ; \\ \phi_h^\varepsilon = r^\varepsilon \tilde{K}_l^\varepsilon \nabla p^\varepsilon + \tilde{A}_h^\varepsilon \nabla r^\varepsilon - \beta_2 (r^\varepsilon \tilde{K}_l^\varepsilon + \omega \alpha_1 r^\varepsilon \tilde{K}_g^\varepsilon)\mathbf{e} \ ; \\ \tilde{K}_l^\varepsilon = k_{r,l}(S_g^\varepsilon, x/\varepsilon)\tilde{\mathbb{K}}(x/\varepsilon) \ ; \\ \tilde{A}_h^\varepsilon = \tilde{K}_g^\varepsilon + \tilde{D}_h^\varepsilon \ ; \\ \tilde{K}_g^\varepsilon = \beta_1 r^\varepsilon k_{r,g}(S_g^\varepsilon, x/\varepsilon)\tilde{\mathbb{K}}(x/\varepsilon) \ ; \\ \tilde{D}_h^\varepsilon = \alpha_3 \tilde{\Phi}(x/\varepsilon)(1 - S_g^\varepsilon) \ ; \\ F_w^\varepsilon = \alpha_1 \gamma_2 \dfrac{\mathcal{F}^w(x/\varepsilon)}{\mathcal{F}_0} \equiv F_w(x/\varepsilon) \ ; \\ F_h^\varepsilon = \gamma_2 \dfrac{\mathcal{F}^h(x/\varepsilon)}{\mathcal{F}_0} \equiv F_h(x/\varepsilon) \ . \end{cases} \tag{9.6}$$

Et où les fonctions $\tilde{\Phi}(y)$, $\tilde{\mathbb{K}}(y)$, $\mathcal{F}^w$(y), $\mathcal{F}^h$(y), $\tilde{f}(\cdot, y)$, $k_{r,l}(\cdot, y)$ et $k_{r,g}(\cdot, y)$ sont toutes P-périodique par rapport à y.

Remarquons que les inconnues du système (9.4)-(9.5) sont désormais notées p^ε et r^ε de manière à faire apparaître leur dépendance à ε. On précise cette dépendance en supposant que les inconnues p^ε et r^ε se développent en puissance de ε de la manière suivante

$$p^\varepsilon \equiv p^\varepsilon(x,y) = p^0(x,y) + \varepsilon p^1(x,y) + \varepsilon^2 p^2(x,y) + \cdots \tag{9.7}$$

$$r^\varepsilon \equiv r^\varepsilon(x,y) = r^0(x,y) + \varepsilon r^1(x,y) + \varepsilon^2 r^2(x,y) + \cdots \tag{9.8}$$

avec $y \equiv x/\varepsilon$ et où les p^i et les r^i sont P-périodiques en y. Dans ce formalisme, x est appelé variable lente et y variable rapide.

Remarquons finalement la règle de calcul élémentaire qui dit que pour le champ scalaire $u(x, x/\varepsilon)$ et pour le champ vectoriel $\mathbf{v}(x, x/\varepsilon)$, on a

$$\nabla u \equiv \nabla_x u + \varepsilon^{-1} \nabla_y u \quad \text{et} \quad \text{div } \mathbf{v} \equiv \text{div}_x \mathbf{v} + \varepsilon^{-1} \text{div}_y \mathbf{v} \tag{9.9}$$

9.1.2 Développement asymptotique

On procède ici au développement asymptotique en puissance successive de ε des équations de conservation de la masse pour le composant eau (équation (9.4)) et pour le composant hydrogène (équation (9.5)).

Conservation de la masse du composant eau

Notons $\partial_1 \tilde{f}$ la dérivée de $\tilde{f}$ par rapport à sa première variable. On notera de la même manière $\partial_1 k_{r,l}$ et $\partial_1 k_{r,g}$ les dérivées de $k_{r,l}$ et de $k_{r,g}$ par rapport à leur première variable. Compte tenu de la forme de p^ε et de r^ε donnée par les relations (9.7) et (9.8) et en considérant le développement de Taylor de $\tilde{f}$ selon la première variable, S_g^ε se développe ainsi

$$\begin{aligned} S_g^\varepsilon =& \tilde{f}(r^\varepsilon - p^\varepsilon, y) \\ =& \tilde{f}(r^0 - p^0, y) + \varepsilon(r^1 - p^1)\partial_1 \tilde{f}(r^0 - p^0, y) \\ &+ \varepsilon^2 \left((r^2 - p^2)\partial_1 \tilde{f}(r^0 - p^0, y) + \frac{1}{2}(r^1 - p^1)^2 \partial_{1,1}^2 \tilde{f}(r^0 - p^0, y) \right) + \cdots \end{aligned}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Ce que l'on écrit encore

$$S_g^\varepsilon = S_g^0 + \varepsilon S_g^1 + \varepsilon^2 S_g^2 + \cdots$$

avec

$$\begin{aligned} S_g^0 = \tilde{f}(r^0 - p^0, y) \ ; \ S_g^1 = (r^1 - p^1)\partial_1 \tilde{f}(r^0 - p^0, y) \quad \text{et} \\ S_g^2 = (r^2 - p^2)\partial_1 \tilde{f}(r^0 - p^0, y) + \frac{1}{2}(r^1 - p^1)^2 \partial_{1,1}^2 \tilde{f}(r^0 - p^0, y) \end{aligned} \tag{9.10}$$

On peut donc développer le terme β_w^ε (voir équations (9.6)) en

$$\beta_w^\varepsilon = \beta_w^0 + \varepsilon \beta_w^1 + \cdots$$

avec

$$\beta_w^0 = -\tilde{\Phi} S_g^0 \quad \text{et} \quad \beta_w^1 = -\tilde{\Phi} S_g^1 \tag{9.11}$$

En développant $k_{r,l}(S_g^\varepsilon, y)$ selon le même principe que pour $\tilde{f}(r^\varepsilon - p^\varepsilon, y)$, le tenseur $\tilde{K}_l^\varepsilon$ (voir équations (9.6)) se développe en

$$\tilde{K}_l^\varepsilon = \tilde{K}_l^0 + \varepsilon \tilde{K}_l^1 + \varepsilon^2 \tilde{K}_l^2 + \cdots$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{K}_l^0 = k_{r,l}(S_g^0, y)\tilde{\mathbb{K}} \ ; \ \tilde{K}_l^1 = S_g^1 \partial_1 k_{r,l}(S_g^0, y)\tilde{\mathbb{K}} \quad \text{et} \\ \tilde{K}_l^2 = S_g^2 \partial_1 k_{r,l}(S_g^0, y)\tilde{\mathbb{K}} + \frac{1}{2}(S_g^1)^2 \partial_{1,1}^2 k_{r,l}(S_g^0, y)\tilde{\mathbb{K}} \end{aligned} \tag{9.12}$$

De plus, en suivant la relation (9.9), le gradient de p^ε s'écrit

$$\nabla p^\varepsilon = \varepsilon^{-1} \nabla_y p^0 + (\nabla_x p^0 + \nabla_y p^1) + \varepsilon(\nabla_x p^1 + \nabla_y p^2) + \cdots$$

De sorte que le flux d'eau ϕ_w^ε (voir équations (9.6)) se développe en

$$\phi_w^\varepsilon = \varepsilon^{-1} \phi_w^{-1} + \phi_w^0 + \varepsilon \phi_w^1 + \cdots$$

avec

$$\begin{aligned} &\phi_w^{-1} = \tilde{K}_l^0 \nabla_y p^0 \ ; \\ &\phi_w^0 = \tilde{K}_l^1 \nabla_y p^0 + \tilde{K}_l^0 (\nabla_x p^0 - \beta_2 \mathbf{e} + \nabla_y p^1) \ ; \\ &\phi_w^1 = \tilde{K}_l^2 \nabla_y p^0 + \tilde{K}_l^1 (\nabla_x p^0 - \beta_2 \mathbf{e} + \nabla_y p^1) + \tilde{K}_l^0 (\nabla_x p^1 + \nabla_y p^2) \ . \end{aligned} \tag{9.13}$$

En suivant le développement de ϕ_w^ε et la relation (9.9), on obtient le développement de $\mathrm{div}\phi_w^\varepsilon$ suivant

$$\mathrm{div}\phi_w^\varepsilon = \varepsilon^{-2} \mathrm{div}_y \phi_w^{-1} + \varepsilon^{-1} \left(\mathrm{div}_x \phi_w^{-1} + \mathrm{div}_y \phi_w^0 \right) + \left(\mathrm{div}_x \phi_w^0 + \mathrm{div}_y \phi_w^1 \right) + \cdots$$

En injectant cette relation et le développement de β_w^ε dans l'équation de conservation de la masse d'eau (9.4) et en regroupant les termes du même ordre, on obtient finalement

$$\begin{aligned} 0 = &\varepsilon^{-2} \left(-\mathrm{div}_y \phi_w^{-1} \right) \\ &+ \varepsilon^{-1} \left(-\mathrm{div}_x \phi_w^{-1} - \mathrm{div}_y \phi_w^0 \right) \\ &+ \left(\partial_t \beta_w^0 - \mathrm{div}_x \phi_w^0 - \mathrm{div}_y \phi_w^1 - F_w \right) \\ &+ \cdots \end{aligned} \tag{9.14}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Conservation de la masse du composant hydrogène

On procède de la même manière pour l'équation de conservation de la masse d'hydrogène. En suivant le développement de S_g^ε donné en (9.10) et de r^ε donné en (9.8), le terme β_h^ε (voir équations (9.6)) se développe en

$$\beta_h^\varepsilon = \beta_h^0 + \varepsilon\beta_h^1 + \cdots$$

avec

$$\beta_h^0 = \tilde{\Phi}(1+\bar{\omega}S_g^0)r^0 \quad \text{et} \quad \beta_h^1 = \tilde{\Phi}\bar{\omega}S_g^1 r^0 + \tilde{\Phi}(1+\bar{\omega}S_g^0)r^1 \tag{9.15}$$

De la même manière que pour $\tilde{K}_l^\varepsilon$, on développe $\tilde{K}_g^\varepsilon$ (voir équations (9.6)) en

$$\tilde{K}_g^\varepsilon = \tilde{K}_g^0 + \varepsilon\tilde{K}_g^1 + \varepsilon^2\tilde{K}_g^2 + \cdots$$

avec

$$\begin{aligned}
\tilde{K}_g^0 =& \beta_1 r^0 k_{r,g}(S_g^0, y)\tilde{\mathbb{K}} \ ; \\
\tilde{K}_g^1 =& \beta_1 \left[r^1 k_{r,g}(S_g^0, y) + r^0 S_g^1 \partial_1 k_{r,g}(S_g^0, y) \right] \tilde{\mathbb{K}} \quad \text{et} \\
\tilde{K}_g^2 =& \beta_1 \Big[r^2 k_{r,g}(S_g^0, y) + r^1 S_g^1 \partial_1 k_{r,g}(S_g^0, y) \\
& + r^0 \left(\frac{1}{2}(S_g^1)^2 \partial 1, 1^2 k_{r,g}(S_g^0, y) + S_g^2 \partial_1 k_{r,g}(S_g^0, y) \right) \Big] \tilde{\mathbb{K}}
\end{aligned} \tag{9.16}$$

Et le terme $\tilde{D}_h^\varepsilon$ (voir équations (9.6)) se développe en

$$\tilde{D}_h^\varepsilon = \tilde{D}_h^0 + \varepsilon\tilde{D}_h^1 + \varepsilon^2\tilde{D}_h^2 + \cdots$$

avec

$$\tilde{D}_h^0 = \alpha_3\Phi(1-S_g^0) \ ; \ \tilde{D}_h^1 = -\alpha_3\Phi S_g^1 \text{ et } \tilde{D}_h^2 = -\alpha_3\Phi S_g^2 \tag{9.17}$$

En notant, pour tout $i \in \mathbb{N}$, $\tilde{A}_h^i = \tilde{K}_g^i + \tilde{D}_h^i$, le tenseur $\tilde{A}_h^\varepsilon$ se développe en

$$\tilde{A}_h^\varepsilon = \tilde{A}_h^0 + \varepsilon\tilde{A}_h^1 + \varepsilon^2\tilde{A}_h^2 + \cdots$$

et, en suivant la relation (9.9), le gradient de r^ε s'écrit

$$\nabla r^\varepsilon = \varepsilon^{-1}\nabla_y r^0 + (\nabla_x r^0 + \nabla_y r^1) + \varepsilon(\nabla_x r^1 + \nabla_y r^2) + \cdots$$

De sorte que le flux d'hydrogène ϕ_h^ε (voir équations (9.6)) se développe en

$$\phi_h^\varepsilon = \varepsilon^{-1}\phi_h^{-1} + \phi_h^0 + \varepsilon\phi_h^1 + \cdots$$

avec

$$\begin{aligned}
\phi_h^{-1} =& r^0\phi_w^{-1} + \tilde{A}_h^0\nabla_y r^0 \ ; \\
\phi_h^0 =& r^1\phi_w^{-1} + r^0\phi_w^0 + \tilde{A}_h^1\nabla_y r^0 + \tilde{A}_h^0(\nabla_x r^0 + \nabla_y r^1) - \omega\alpha_1\beta_2 r^0\tilde{K}_g^0\mathbf{e} \ ; \\
\phi_h^1 =& r^2\phi_w^{-1} + r^1\phi_w^0 + r^0\phi_w^1 \\
& + \tilde{A}_h^2\nabla_y r^0 + \tilde{A}_h^1(\nabla_x r^0 + \nabla_y r^1) + \tilde{A}_h^0(\nabla_x r^1 + \nabla_y r^2) \\
& - \omega\alpha_1\beta_2(r^1\tilde{K}_g^0 + r^0\tilde{K}_g^0)\mathbf{e} \ .
\end{aligned} \tag{9.18}$$

Comme précédemment, en suivant le développement de ϕ_h^ε et la relation (9.9), on obtient le développement de $\mathrm{div}\phi_h^\varepsilon$ suivant

$$\mathrm{div}\phi_h^\varepsilon = \varepsilon^{-2}\mathrm{div}_y\phi_h^{-1} + \varepsilon^{-1}\left(\mathrm{div}_x\phi_h^{-1} + \mathrm{div}_y\phi_h^0\right) + \left(\mathrm{div}_x\phi_h^0 + \mathrm{div}_y\phi_h^1\right) + \cdots$$

En injectant cette relation et le développement de β_h^ε dans l'équation de conservation de la masse d'eau (9.4) et en regroupant les termes du même ordre, on obtient finalement

$$\begin{aligned} 0 = {} & \varepsilon^{-2}\left(-\mathrm{div}_y \phi_h^{-1}\right) \\ & + \varepsilon^{-1}\left(-\mathrm{div}_x \phi_h^{-1} - \mathrm{div}_y \phi_h^0\right) \\ & + \left(\partial_t \beta_h^0 - \mathrm{div}_x \phi_h^0 - \mathrm{div}_y \phi_h^1 - F_h\right) \\ & + \cdots \end{aligned} \tag{9.19}$$

9.1.3 Équations macroscopiques

Dans les équations (9.14) et (9.19) on voit apparaître des termes d'ordre successifs en ε dont la somme *infinie* est égale à zéro. Ces deux équations étant supposées valables pour toute valeur de ε, on en déduit que chacun des termes de ces sommes est nul. On dérive ainsi des équations (9.14) et (9.19) une infinité d'équations.

En étudiant les équations issues des termes d'ordres les plus bas, on va montrer ici qu'on obtient des équations décrivant les inconnues à l'ordre zéro (p^0 et r^0) et ne faisant intervenir que la variable d'espace lente (x). Pour ces raisons, on parlera des *équations macroscopiques* concernant ce nouveau système d'équations.

Les termes d'ordre ε^{-2}

Considérons tout d'abord le terme en ε^{-2} de l'équation (9.14) qui nous donne l'équation suivante

$$-\mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0 \nabla_y p^0) = 0 \tag{9.20}$$

où l'on rappelle que $p^0(x,y)$ est P-périodique par rapport à y.

De manière générale, on sait (voir par exemple [BLP78]) que le problème

$$\begin{cases} u(y) \text{ est } P\text{-périodique} \\ -\mathrm{div}_y(A(y)\nabla_y u) = Q(y) \end{cases}$$

est bien posé, l'inconnue u étant définie à une constante près, si le tenseur $A(y)$ satisfait

$$\exists C > 0 \quad \forall y \in P \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d \quad A(y)\xi \cdot \xi \geq C$$

et si le second membre $Q(y)$ satisfait

$$\int_P Q(y) dy = 0$$

Cette dernière condition est classiquement appelée *alternative de Fredholm*. De plus, pour $Q = 0$, les solutions de ce problème périodique sont les fonctions constantes. En particulier, on a alors $\nabla_y u = 0$.

La relation (9.20) nous fournit le problème, paramétré par x, suivant

$$\begin{cases} p^0(x,y) \text{ est } P\text{-périodique par rapport à } y \\ -\mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0 \nabla_y p^0) = 0 \end{cases}$$

Compte tenu de ce qui précède et en supposant que $\tilde{K}_l^0$ est uniformément elliptique, on en conclut donc que $\nabla_y p^0 = 0$. Autrement dit, p^0 ne dépend que de la variable lente x,

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

on notera donc dans la suite simplement $p^0(x)$ et non plus $p^0(x,y)$. Remarquons enfin que cela implique d'après (9.13) que $\phi_w^{-1} = 0$.

Le terme en ε^{-2} de l'équation (9.19) nous fournit quant à lui la relation

$$-\mathrm{div}_y(r^0\phi_w^{-1} + \tilde{A}_h^0\nabla_y r^0) = 0$$

qui devient, puisque $\phi_w^{-1} = 0$,

$$-\mathrm{div}_y(\tilde{A}_h^0\nabla_y r^0) = 0 \tag{9.21}$$

La relation (9.21) définit, de la même manière que pour la relation (9.20), un problème périodique selon y et paramétré par x d'inconnue $r^0(x,y)$. En supposant $\tilde{A}_h^0$ uniformément elliptique, on en conclut donc que $\nabla_y r^0 = 0$ et $\phi_h^{-1} = 0$. On notera dans la suite $r^0(x)$ à la place de $r^0(x,y)$ pour marquer l'indépendance de r^0 à la variable rapide y.

Les termes d'ordre ε^{-1}

Le terme en ε^{-1} de l'équation (9.14) nous fournit la relation

$$-\mathrm{div}_x\phi_w^{-1} - \mathrm{div}_y\phi_w^0 = 0$$

Sachant que $\phi_w^{-1} = 0$ et $\nabla_y p^0 = 0$, on obtient l'équation suivante

$$\mathrm{div}_y\phi_w^0 = 0 \tag{9.22}$$

que l'on écrit encore

$$-\mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0\nabla_y p^1) = \mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0(\nabla_x p^0 - \beta_2\mathbf{e})) \tag{9.23}$$

Encore une fois, l'équation (9.23) définit un problème, d'inconnue $p^1(x,y)$, P-périodique en y et paramétré par x. En supposant que $\tilde{K}_l^0$ est uniformément elliptique, ce problème est bien posé si l'alternative de Fredholm est satisfaite, à savoir ici

$$\int_P \mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0(\nabla_x p^0 - \beta_2\mathbf{e}))dy = 0$$

Remarquons que $\tilde{K}_l^0\nabla_x(p^0 + \beta_2 z)$ est P-périodique par rapport à y et que, de manière générale, si $\mathbf{g}(y)$ est une fonction P-périodique à valeur dans $\mathbb{R}^d$, on a

$$\begin{aligned}\int_P \mathrm{div}_y\,\mathbf{g}(y)dy &= \int_{\partial P}\mathbf{g}(y)\cdot\mathbf{n}(y)dy \quad \text{où } \mathbf{n}(y) \text{ est la normale sortante de } P \text{ en } y\\ &= 0 \quad \text{les termes s'annulant bords à bords}\end{aligned}$$

On en déduit que l'alternative de Fredholm est bien satisfaite et que le problème est donc bien posé.

En outre, ce problème est linéaire et en particulier l'inconnue $p^1(x,y)$ dépend linéairement du vecteur, indépendant de y, $(\nabla_x p^0 - \beta_2\mathbf{e})$. Pour mettre en évidence cette dépendance, considérons la famille de fonctions $(\psi_{\tilde{K}_l}^k)_{k=1,\cdots,d}$ définie par

$$\begin{cases}\text{Pour } k = 1,\cdots,d\\ \psi_{\tilde{K}_l}^k \text{ est } P\text{-périodique telle que}\\ -\mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0\nabla_y\psi_{\tilde{K}_l}^k) = \mathrm{div}_y(\tilde{K}_l^0\mathbf{e}_k)\end{cases} \tag{9.24}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

où la famille de vecteurs $(\mathbf{e}_k)_{k=1,\cdots,d}$ est la base canonique de $\mathbb{R}^d$. On vérifie alors facilement que l'on a

$$p^1 = \sum_{k=1}^{d} \psi^k_{\tilde{K}_l} \mathbf{e}_k \cdot (\nabla_x p^0 - \beta_2 \mathbf{e}) \quad \text{à une constante près}$$

et, de manière exacte,

$$\nabla_y p^1 = \sum_{k=1}^{d} (\nabla_y \psi^k_{\tilde{K}_l}) \mathbf{e}_k \cdot (\nabla_x p^0 - \beta_2 \mathbf{e}) \tag{9.25}$$

Le terme en ε^{-1} de l'équation (9.19) nous fournit la relation

$$-\mathrm{div}_x \phi^{-1}_h - \mathrm{div}_y \phi^0_h = 0$$

Sachant que $\phi^{-1}_w = 0$ et $\nabla_y r^0 = 0$, on en déduit que

$$-\mathrm{div}_y \left(r^0 \phi^0_w + \tilde{A}^0_h (\nabla_x r^0 + \nabla_y r^1) - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \tilde{K}^0_g \mathbf{e} \right) = 0$$

ce que l'on peut encore simplifier en

$$-\mathrm{div}_y (\tilde{A}^0_h \nabla_y r^1) = \mathrm{div}_y (\tilde{A}^0_h \nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \tilde{K}^0_g \mathbf{e}) \tag{9.26}$$

car on a montré (voir relation (9.22)) que $\mathrm{div}_y \phi^0_w = 0$. De la même manière que pour l'équation (9.23), cette équation définit un problème, d'inconnue $r^1(x, y)$, P-périodique en y et paramétré par x. L'alternative de Fredholm est bien satisfaite, et $\tilde{A}^0_h$ étant supposé uniformément uniforme, ce problème est donc bien posé et la solution est définie à une constante près.

Comme ce qui a été fait avec p^1, on souhaite ici mettre en évidence la dépendance linéaire de r^1 aux vecteurs $\nabla_x r^0$ et $\mathbf{e}$. Pour cela, commençons par réécrire (9.26) en tenant compte du fait que $\tilde{A}^0_h = \tilde{D}^0_h + \tilde{K}^0_g$ (voir les équations (9.3), (9.16) et (9.17)) :

$$-\mathrm{div}_y (\tilde{A}^0_h \nabla_y r^1) = \mathrm{div}_y \left(\tilde{D}^0_h \nabla_x r^0 + \tilde{K}^0_g (\nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \mathbf{e}) \right)$$

Puis considérons les deux familles de fonctions $(\psi^k_{\tilde{D}_h})_{k=1,\cdots,d}$ et $(\psi^k_{\tilde{K}_g})_{k=1,\cdots,d}$ définies par

$$\begin{cases} \text{Pour } k = 1, \cdots, d \\ \psi^k_{\tilde{D}_h} \text{ est } P\text{-périodique telle que} \\ -\mathrm{div}_y (\tilde{A}^0_h \nabla_y \psi^k_{\tilde{D}_h}) = \mathrm{div}_y (\tilde{D}^0_h \mathbf{e}_k) \end{cases} \tag{9.27}$$

et

$$\begin{cases} \text{Pour } k = 1, \cdots, d \\ \psi^k_{\tilde{K}_g} \text{ est } P\text{-périodique telle que} \\ -\mathrm{div}_y (\tilde{A}^0_h \nabla_y \psi^k_{\tilde{K}_g}) = \mathrm{div}_y (\tilde{K}^0_g \mathbf{e}_k) \end{cases} \tag{9.28}$$

On vérifie alors facilement que l'on a

$$r^1 = \sum_{k=1}^{d} \psi^k_{\tilde{D}_h} \mathbf{e}_k \cdot \nabla_x r^0 + \sum_{k=1}^{d} \psi^k_{\tilde{K}_g} \mathbf{e}_k \cdot (\nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \mathbf{e}) \quad \text{à une constante près}$$

et, de manière exacte,

$$\nabla_y r^1 = \sum_{k=1}^{d} (\nabla_y \psi^k_{\tilde{D}_h}) \mathbf{e}_k \cdot \nabla_x r^0 + \sum_{k=1}^{d} (\nabla_y \psi^k_{\tilde{K}_g}) \mathbf{e}_k \cdot (\nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \mathbf{e}) \tag{9.29}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Les termes d'ordre ε^0

Commençons par introduire l'opérateur de *moyenne sur* P, noté $\langle\cdot\rangle$, qui opère sur une fonction quelconque g de la variable rapide y par :

$$\langle g\rangle = \frac{1}{|P|}\int_P g(y)dy \tag{9.30}$$

Remarquons que, pour $\mathbf{g}(y)$ une fonction P-périodique à valeur dans $\mathbb{R}^d$, on a vu précédemment que $\int_P \mathrm{div}_y\,\mathbf{g}dy = 0$ d'où l'on déduit que $\langle \mathrm{div}_y\,\mathbf{g}\rangle = 0$.

Le terme en ε^0 de l'équation (9.14) nous fournit la relation

$$\partial_t\beta_w^0 - \mathrm{div}_x\phi_w^0 - \mathrm{div}_y\phi_w^1 = F_w$$

Appliquons l'opérateur de moyenne sur P à cette équation. $\phi_w^1(x,y)$ étant P-périodique par rapport à y, on obtient

$$\partial_t\left\langle\beta_w^0\right\rangle - \mathrm{div}_x\left\langle\phi_w^0\right\rangle = \langle F_w\rangle$$

qui constitue l'équation *macroscopique* de conservation de la masse du composant eau.

Le terme $\langle F_w\rangle$ ne pose pas de problème particulier. Le terme $\langle\beta_w^0\rangle$ non plus et s'écrit

$$\left\langle\beta_w^0\right\rangle = -\left\langle\tilde{\Phi}(y)\tilde{f}(r^0-p^0,y)\right\rangle$$

En introduisant $\tilde{\theta}_g^*$, la teneur en gaz normalisée *effective*, qui est d'après (9.3) une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ définie par

$$\tilde{\theta}_g^* : \pi \to \left\langle\tilde{\Phi}(y)\tilde{f}(\pi,y)\right\rangle \tag{9.31}$$

on peut encore écrire

$$\left\langle\beta_w^0\right\rangle = -\tilde{\theta}_g^*(r^0-p^0) \tag{9.32}$$

En utilisant les relations (9.25) et $\nabla_y p^0 = 0$, le terme $\langle\phi_w^0\rangle$ devient

$$\begin{aligned}\left\langle\phi_w^0\right\rangle &= \left\langle\tilde{K}_l^0\left(\nabla_x p^0 - \beta_2\mathbf{e} + \sum_{k=1}^d(\nabla_y\psi_{\tilde{K}_l}^k)\mathbf{e}_k\cdot(\nabla_x p^0-\beta_2\mathbf{e})\right)\right\rangle \\ &= \tilde{K}_l^*(\nabla_x p^0 - \beta_2\mathbf{e})\end{aligned} \tag{9.33}$$

où le tenseur $\tilde{K}_l^*$ est défini par

$$\tilde{K}_l^*\mathbf{e}_k = \left\langle\tilde{K}_l^0\left(\mathbf{e}_k + \nabla_y\psi_{\tilde{K}_l}^k\right)\right\rangle \quad , \; k = 1,\cdots,d \tag{9.34}$$

et ne dépend que de p^0 et r^0 (voir les équations (9.12) et (9.24)). L'équation macroscopique de conservation de la masse d'eau peut donc s'écrire

$$-\frac{\partial\tilde{\theta}_g^*(r^0-p^0)}{\partial t} - \mathrm{div}_x(\tilde{K}_l^*\nabla_x p^0 - \beta_2\tilde{K}_l^*\mathbf{e}) = \langle F_w\rangle \tag{9.35}$$

Le terme en ε^0 de l'équation (9.19) nous fournit quant à lui la relation

$$\partial_t\beta_h^0 - \mathrm{div}_x\phi_h^0 - \mathrm{div}_y\phi_h^1 = F_h$$

qui devient en appliquant l'opérateur de moyenne sur P, ϕ_h^1 étant P-périodique par rapport à y,

$$\partial_t\left\langle\beta_h^0\right\rangle - \mathrm{div}_x\left\langle\phi_h^0\right\rangle = \langle F_h\rangle$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

qui constitue l'équation *macroscopique* de conservation de la masse du composant hydrogène.

Le terme $\langle F_h \rangle$ ne pose pas de problème et, comme $\nabla_y r^0 = 0$ et $\phi_w^{-1} = 0$, le terme $\langle \phi_h^0 \rangle$ s'écrit

$$\left\langle \phi_h^0 \right\rangle = r^0 \left\langle \phi_w^0 \right\rangle + \left\langle \tilde{A}_h^0 (\nabla_x r^0 + \nabla_y r^1) - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \tilde{K}_g^0 \mathbf{e} \right\rangle$$

En reprenant l'expression de $\nabla_y r^1$ donnée en (9.29) et en utilisant le fait que $\tilde{A}_h^0 = \tilde{D}_h^0 + \tilde{K}_g^0$, on peut encore écrire que

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_h^0 \right\rangle = r^0 \left\langle \phi_w^0 \right\rangle &+ \left\langle \tilde{D}_h^0 \nabla_x r^0 + \sum_{k=1}^{d} (\tilde{A}_h^0 \nabla_y \psi_{\tilde{D}_h}^k) \mathbf{e}_k \cdot \nabla_x r^0 \right\rangle \\ &+ \left\langle \tilde{K}_g^0 (\nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \mathbf{e}) + \sum_{k=1}^{d} (\tilde{A}_h^0 \nabla_y \psi_{\tilde{K}_g}^k) \mathbf{e}_k \cdot (\nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \mathbf{e}) \right\rangle \end{aligned}$$

Finalement, on obtient

$$\left\langle \phi_h^0 \right\rangle = r^0 \tilde{K}_l^* (\nabla_x p^0 - \beta_2 \mathbf{e}) + \tilde{D}_h^* \nabla_x r^0 + \tilde{K}_g^* (\nabla_x r^0 - \omega \alpha_1 \beta_2 r^0 \mathbf{e}) \tag{9.36}$$

où les tenseurs $\tilde{D}_h^*$ et $\tilde{K}_g^*$ sont définis par

$$\tilde{D}_h^* \mathbf{e}_k = \left\langle \tilde{D}_h^0 \mathbf{e}_k + \tilde{A}_h^0 \nabla_y \psi_{\tilde{D}_h}^k \right\rangle \quad , \; k = 1, \cdots, d \tag{9.37}$$

et

$$\tilde{K}_g^* \mathbf{e}_k = \left\langle \tilde{K}_g^0 \mathbf{e}_k + \tilde{A}_h^0 \nabla_y \psi_{\tilde{K}_g}^k \right\rangle \quad , \; k = 1, \cdots, d \tag{9.38}$$

et ne dépendent que de p^0 et r^0 (voir les équations (9.16) , (9.17), (9.27) et (9.28)). En reprenant la notion de teneur en gaz normalisée *effective*, $\tilde{\theta}_g^*$, définie par la relation (9.31), le terme $\langle \beta_h^0 \rangle$ s'écrit quant à lui

$$\left\langle \beta_h^0 \right\rangle = \left(\left\langle \tilde{\Phi} \right\rangle + \bar{\omega} \tilde{\theta}_g^* \right) r^0 \tag{9.39}$$

L'équation macroscopique de conservation de la masse d'hydrogène peut donc s'écrire

$$\frac{\partial \left(\left\langle \tilde{\Phi} \right\rangle + \bar{\omega} \tilde{\theta}_g^* \right) r^0}{\partial t} - \mathrm{div}_x (r^0 \tilde{K}_l^* \nabla_x p^0 + (\tilde{D}_h^* + \tilde{K}_g^*) \nabla_x r^0 - \beta_2 r^0 (\tilde{K}_l^* + \omega \alpha_1 \tilde{K}_g^*) \mathbf{e}) = \langle F_h \rangle \tag{9.40}$$

9.1.4 Définition des grandeurs effectives

On vient d'obtenir, via les équations (9.35) et (9.40), une description à l'échelle macroscopique du système (9.4)-(9.5), c'est-à-dire une description où l'échelle microscopique (le paramètre ε et la variable d'espace rapide y) a disparu. On va maintenant voir que ces équations macroscopiques conservent la structure des équations d'origine (9.1) et (9.2) moyennant l'introduction de grandeurs effectives. Ces grandeurs effectives définissent ainsi un milieux poreux effectif "équivalent" (à l'échelle macroscopique) au milieux poreux à deux échelles.

Rappelons qu'un milieu poreux est caractérisé par sa porosité et sa perméabilité absolue ainsi que par ses fonctions de perméabilités relatives et de pression capillaire. Dans la suite, on notera chaque grandeur effective de la même manière que son pendant microscopique mais muni de l'exposant *.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Porosité effective

On définit la porosité effective normalisée comme la moyenne sur P de la porosité normalisée :

$$\tilde{\Phi}^* \equiv \left\langle \tilde{\Phi} \right\rangle \tag{9.41}$$

On notera que cette définition rejoint la définition physique faite en section 4.2.1.

Perméabilité absolue effective

On a vu dans la section 4.2.3 que la perméabilité absolue caractérise, via la loi de Darcy, l'écoulement dans un milieu poreux saturé. En suivant cette idée et en s'appuyant sur la forme du flux $\langle \phi_w^0 \rangle$ donnée par l'équation (9.33), on définit donc la perméabilité absolue effective adimensionnée par

$$\tilde{\mathbb{K}}^* \mathbf{e}_k \equiv \left\langle \tilde{\mathbb{K}} \left(\mathbf{e}_k + \nabla_y \psi_{\tilde{\mathbb{K}}}^k \right) \right\rangle \quad , \; k = 1, \cdots, d \tag{9.42}$$

avec

$$\begin{cases} \text{Pour } k = 1, \cdots, d \\ \psi_{\tilde{\mathbb{K}}}^k \text{ est } P\text{-périodique telle que} \\ -\operatorname{div}_y(\tilde{\mathbb{K}} \nabla_y \psi_{\tilde{\mathbb{K}}}^k) = \operatorname{div}_y(\tilde{\mathbb{K}} \mathbf{e}_k) \end{cases} \tag{9.43}$$

Un résultat classique (voir par exemple [SP80]) nous dit que si $\mathbb{K}(y)$ est uniformément elliptique, alors $\mathbb{K}^*$ est elliptique. En particulier, $\mathbb{K}^*$ est alors inversible.

Saturation en gaz effective et loi de pression capillaire effective

On a défini précédemment la teneur en gaz effective normalisé, $\tilde{\theta}_g^*$, (voir la relation (9.31)) ainsi que la porosité effective normalisée, $\tilde{\Phi}^*$, (voir la relation (9.41)). Au niveau microscopique, on a la relation suivante

$$\tilde{\theta}_g = \tilde{\Phi} S_g$$

que l'on souhaite pouvoir transposer aux grandeurs effectives pour avoir $\tilde{\theta}_g^* = \tilde{\Phi}^* S_g^*$. On définit donc

$$S_g^* \equiv \tilde{f}^*(r^0 - p^0) \quad \text{avec} \quad \tilde{f}^*(\pi) \equiv \frac{\tilde{\theta}_g^*(\pi)}{\tilde{\Phi}^*} = \frac{\left\langle \tilde{\Phi} \tilde{f}(\pi) \right\rangle}{\left\langle \tilde{\Phi} \right\rangle} \tag{9.44}$$

On vérifie aisément que $\tilde{f}^*$ conserve les propriétés de $\tilde{f}$, à savoir : $\tilde{f} \geq 0$, $\tilde{f} \leq 1$, $\tilde{f}(0) = 0$ et $\tilde{f}' \geq 0$. On peut enfin définir la loi de pression capillaire effective adimensionnée par

$$\tilde{p}_c^*(S_g^*) \equiv (\tilde{f}^*)^{-1}(S_g^*) \quad \text{pour} \quad S_g^* > 0 \tag{9.45}$$

$\tilde{p}_c^*$ se prolonge par continuité en $S_g^* = 0$, définissant ainsi la pression d'entrée effective adimensionnée, $\tilde{p}_c^*(0)$.

Remarquons enfin que les termes $\langle \beta_w^0 \rangle$ et $\langle \beta_h^0 \rangle$ s'écrivent alors

$$\left\langle \beta_w^0 \right\rangle = -\tilde{\Phi}^* S_g^* \quad \text{et} \quad \left\langle \beta_h^0 \right\rangle = \tilde{\Phi}^* (1 + \bar{\omega} S_g^*) r^0$$

en accord avec l'écriture de β_w et β_h :

$$\beta_w = -\tilde{\Phi} S_g \quad \text{et} \quad \beta_h = \tilde{\Phi}(1 + \bar{\omega} S_g) r$$

Perméabilités relatives effectives

On a définit précédemment les tenseurs effectifs de perméabilités globales, $\tilde{K}_l^*$ et $\tilde{K}_g^*$, (voir les relations (9.34) et (9.38)) ainsi que le tenseur effectif de perméabilité absolue, $\tilde{\mathbb{K}}^*$, (voir la relation (9.42)) Dans le système initial (9.1)-(9.2), on a les relations suivantes

$$\tilde{K}_l = k_{r,l}(S_g)\tilde{\mathbb{K}} \quad \text{et} \quad \tilde{K}_g = \beta_1 r k_{r,g}(S_g)\tilde{\mathbb{K}}$$

que l'on souhaite pouvoir transposer aux grandeurs effectives. On définit donc les perméabilités relatives effectives de la phase liquide et de la phase gazeuse par

$$k_{r,l}^* \equiv (\tilde{\mathbb{K}}^*)^{-1}\tilde{K}_l^* \quad \text{et} \quad k_{r,g}^* \equiv \frac{1}{\beta_1 r^0}(\tilde{\mathbb{K}}^*)^{-1}\tilde{K}_g^* \tag{9.46}$$

Remarquons que ces deux grandeurs effectives, $k_{r,l}^*$ et $k_{r,g}^*$, sont des tenseurs tandis que $k_{r,l}$ et $k_{r,g}$ sont des scalaires.

On a vu que $\tilde{K}_l^*$ et $\tilde{K}_g^*$ dépendaient uniquement, de manière générale, des variables p^0 et de r^0 ; par conséquent, $k_{r,l}^*$ et $k_{r,g}^*$ dépendent uniquement des variables p^0 et de r^0. Cependant, pour conserver au plus près la forme du système initial, on va mettre en évidence, si possible, la dépendance des perméabilités relatives effectives, $k_{r,l}^*$ et $k_{r,g}^*$, à la saturation en gaz effective, S_g^*.

Concernant la perméabilité relative effective de la phase liquide, $k_{r,l}^*$, on peut voir dans les relations (9.10), (9.12), (9.24), (9.34) et (9.46) que $k_{r,l}^*$ ne dépend plus précisément que de la différence $(r^0 - p^0)$ via la quantité $\tilde{f}(r^0 - p^0, y)$. Compte tenu de la définition de $\tilde{f}^*$ et de $\tilde{p}_c^*$ et des propriétés de $\tilde{f}$, on vérifie aisément que

$$\forall\, \pi \in \mathbb{R} \quad \forall\, y \in P \quad \tilde{f}(\pi, y) = \tilde{f}\left(\tilde{p}_c^*(\tilde{f}^*(\pi)), y\right)$$

Ceci nous permet de considérer que $k_{r,l}^*$ ne dépend que de $S_g^* = \tilde{f}^*(r^0 - p^0)$ via la quantité $\tilde{f}(\tilde{p}_c^*(S_g^*), y)$. On notera donc $k_{r,l}^*(S_g^*)$.

Concernant la perméabilité relative effective de la phase gazeuse, $k_{r,g}^*$, les relations (9.10), (9.16), (9.17), (9.28), (9.38) et (9.46) font apparaître plus précisément une dépendance de $k_{r,g}^*$ à r^0 d'une part et à $(r^0 - p^0)$, via la quantité $\tilde{f}(r^0 - p^0, y)$, d'autre part. Par le même argument que pour $k_{r,l}^*$, on peut remplacer la dépendance à $(r^0 - p^0)$ par une dépendance à S_g^* et on notera donc $k_{r,g}^*(r^0, S_g^*)$.

Tortuosité effective

Au niveau microscopique, le terme de diffusion est caractérisé par

$$\tilde{D}_h = \alpha_3 \tilde{\Phi}(1 - S_g)$$

Si l'on revient à la présentation de la physique du problème faite au chapitre 4 et en particulier à la section 4.2.4 (p.54) traitant de la diffusion moléculaire, on voit apparaître la notion de tortuosité. La tortuosité est caractérisée par un scalaire sans dimension, τ, qui a été fixé dans notre modélisation physique à $\tau = 1$. Si cette notion de tortuosité est critiquable au niveau physique, elle va nous permettre ici une écriture plus élégante du tenseur effectif de diffusion global, $\tilde{D}_h^*$. L'introduction de la tortuosité transforme la relation précédente de la manière suivante

$$\tilde{D}_h = \alpha_3 \tau \tilde{\Phi}(1 - S_g)$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

On a définit plus haut le tenseur de diffusion global effectif, $\tilde{D}_h^*$, (voir la relation (9.37)) la porosité effective, $\tilde{\Phi}^*$, (voir la relation (9.41)) et la saturation en gaz effective, S_g^*, (voir la relation (9.44)). Afin de conserver la structure du tenseur de diffusion global au niveau macroscopique, on définit donc la tortuosité effective par

$$\tau^* \equiv \frac{1}{\alpha_3 \tilde{\Phi}^* (1 - S_g^*)} \tilde{D}_h^* \tag{9.47}$$

Remarquons que la tortuosité effective, τ^*, est un tenseur tandis que la tortuosité, τ, est un scalaire.

En revenant aux relations (9.10), (9.16), (9.17), (9.27), (9.37) qui définissent le tenseur $\tilde{D}_h^*$, on peut voir que ce dernier ne dépend que de r^0 et de $(r^0 - p^0)$, via la quantité $\tilde{f}(r^0 - p^0, y)$. Pour les mêmes raisons que pour $k_{r,g}^*$, on peut remplacer la dépendance à $(r^0 - p^0)$ par une dépendance à S_g^* et on notera ainsi $\tau^*(r^0, S_g^*)$

9.1.5 Conditions initiales et conditions aux limites

En reprenant les notations matricielles introduites au chapitre 7, on vient donc de voir que le système (9.4)-(9.5), que l'on peut écrire

$$\partial_t \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon) - \mathrm{div}(\phi^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon)) = \mathbf{F}^\varepsilon$$

donne, après homogénéisation, le système (9.35)-(9.40) qui peut s'écrire de manière analogue (voir section précédente) :

$$\partial_t \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0) - \mathrm{div}(\phi^*(\mathbf{u}^0)) = \langle \mathbf{F} \rangle$$

Il ne reste donc plus qu'à déterminer ce que deviennent les conditions aux limites et initiales du problème à deux échelles à l'issue du processus d'homogénéisation.

Dans le cas général, ces conditions sont susceptibles de dépendre tant de la variable d'espace lente que rapide. En vue de l'application à l'exercice Couplex-Gaz (voir le chapitre 8), on s'intéresse ici uniquement au cas où les conditions initiales peuvent varier à l'échelle microscopique, les conditions aux limites étant supposées indépendantes de la variable rapide.

Conditions initiales et aux limites de type macroscopique

En se référant aux développements des inconnues p^ε et r^ε (voir les équations (9.7) et (9.8)) et des flux ϕ_w^ε et ϕ_h^ε (voir les équations (9.13) et (9.18)), on montre facilement (voir par exemple [SHSP92] ou [BLP78]) que des conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann qui ne dépendraient que de la variable d'espace lente dans le problème à deux échelles sont conservées dans le problème homogénéisé. Il en va de même pour des conditions initiales ne dépendant que de la variable d'espace lente (voir par exemple [SP80]).

Plus précisément, si $\Gamma^D \cup \Gamma^N = \partial\mathcal{D}$ est une partition de la frontière d'un domaine $\mathcal{D}$ et si le problème à deux échelles est donné par

$$(P^\varepsilon_{\text{macro}}) \begin{cases} \partial_t \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon) - \mathrm{div}(\phi^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon)) = \mathbf{F}^\varepsilon \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon(0,x,x/\varepsilon)) = \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}_{ini}(x)) \quad \text{sur} \quad \mathcal{D} \\ \mathbf{u}^\varepsilon(t,x,x/\varepsilon) = \mathbf{u}^D(t,x) \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^D \\ \phi^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon(t,x,x/\varepsilon)) = \phi^N(t,x) \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^N \end{cases}$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

alors le problème homogénéisé est donné par

$$(P^H_{\text{macro}}) \begin{cases} \partial_t \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0) - \operatorname{div}(\phi^*(\mathbf{u}^0)) = \langle \mathbf{F}^\varepsilon \rangle \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0(0,x)) = \mathbf{b}^*(\mathbf{u}_{ini}(x)) \quad \text{sur} \quad \mathcal{D} \\ \mathbf{u}^0(t,x) = \mathbf{u}^D(t,x) \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^D \\ \phi^*(\mathbf{u}^0(t,x)) = \phi^N(t,x) \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^N \end{cases}$$

Conditions initiales et second membre

Si, dans l'application du modèle homogénéisé à l'exercice Couplex-Gaz (voir chapitre 8) que l'on mène en section 9.2, les conditions aux limites rencontrées sont bien définies à l'échelle macroscopique, ce n'est pas le cas des conditions initiales qui dépendent, elles, de l'échelle microscopique. Pour traiter cette situation, commençons par rappeler que, indépendamment de l'aspect multi échelles, une condition initiale peut être considérée comme un second membre si l'on fait intervenir la distribution de Dirac en temps.

Partons du modèle initial décrit par le système (9.1) et (9.2) que l'on peut encore écrire sous la forme matricielle suivante

$$\partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}) - \operatorname{div}(\phi(\mathbf{u})) = \mathbf{F}$$

On définit donc le problème suivant

$$(P_0) \begin{cases} \partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}) - \operatorname{div}(\phi(\mathbf{u})) = \mathbf{F} \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}(\mathbf{u}(0,\cdot)) = \mathbf{b}(\mathbf{u}_{ini}) \quad \text{sur} \quad \mathcal{D} \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}^D \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^D \\ \phi(\mathbf{u})\cdot\nu = \phi^N\cdot\nu \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^N \end{cases}$$

On va voir, formellement, que ce problème est équivalent à un problème sur $]-\infty;T[\times\mathcal{D}$ où le second membre est modifié.

Considérons tout d'abord $\mathbf{u}_\infty(x)$, un champ indépendant du temps, tel que

$$\operatorname{div}(\phi(\mathbf{u}_\infty)) = 0 \text{ sur } \mathcal{D} \quad \text{et} \quad \phi(\mathbf{u}_\infty)\cdot\nu = 0 \text{ sur } \Gamma^N$$

On s'intéresse alors au problème suivant

$$(P_{-\infty}) \begin{cases} \partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}) - \operatorname{div}(\phi(\mathbf{u})) = \mathbf{F}\times\mathbb{1}_{(0;T)}(t) + \delta_0(t)(\mathbf{b}(\mathbf{u}_{ini}) - \mathbf{b}(\mathbf{u}_\infty)) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \text{sur} \quad]-\infty;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}(\mathbf{u}(-\infty,\cdot)) = \mathbf{b}(\mathbf{u}_\infty) \quad \text{sur} \quad \mathcal{D} \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}^D\times\mathbb{1}_{(0;T)}(t) + \mathbf{u}_\infty\times\mathbb{1}_{(-\infty;0)}(t) \quad \text{sur} \quad]-\infty;T[\times\Gamma^D \\ \phi(\mathbf{u})\cdot\nu = (\phi^N\cdot\nu)\times\mathbb{1}_{(0;T)}(t) \quad \text{sur} \quad]-\infty;T[\times\Gamma^N \end{cases}$$

On remarque que, pour $\mathbf{u}$ solution de $(P_{-\infty})$, on a

- $\mathbf{u}(t,\cdot) = \mathbf{u}_\infty$ si $t < 0$
- et $\mathbf{u}$ satisfait les conditions aux limites du problème (P_0) si $t > 0$.

On va voir que $\mathbf{u}$ vérifie en plus l'équation d'évolution du problème (P_0) pour les temps positifs ainsi que la condition initiale de (P_0).

Pour cela, multiplions par une fonction test $\mathbf{v}$ l'équation d'évolution du problème $(P_{-\infty})$ et intégrons cette égalité sur $]-\infty,t]\times\mathcal{D}$:

$$\int_{-\infty}^t\int_{\mathcal{D}} (\partial_t\mathbf{b}(\mathbf{u}) - \operatorname{div}(\phi(\mathbf{u})))\,\mathbf{v}\,dxdt = \int_{-\infty}^t\int_{\mathcal{D}} \Big(\mathbf{F}\times\mathbb{1}_{(0;T)} + \delta_0(\mathbf{b}(\mathbf{u}_{ini}) - \mathbf{b}(\mathbf{u}_\infty))\Big)\,\mathbf{v}\,dxdt$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Puisque $\mathbf{u} = \mathbf{u}_\infty$ pour les temps négatifs, on obtient

$$\int_{\mathcal{D}} (\mathbf{b}(\mathbf{u}(t)) - \mathbf{b}(\mathbf{u}_\infty))\,\mathbf{v}\,dx - \int_0^t \int_{\mathcal{D}} \mathrm{div}(\phi(\mathbf{u}))\mathbf{v}\,dxdt = \int_0^t \int_{\mathcal{D}} \mathbf{F}\mathbf{v}\,dxdt + \int_{\mathcal{D}} (\mathbf{b}(\mathbf{u}_{ini}) - \mathbf{b}(\mathbf{u}_\infty))\,\mathbf{v}\,dx$$

Ce qui s'écrit encore

$$\int_{\mathcal{D}} (\mathbf{b}(\mathbf{u}(t)) - \mathbf{b}(\mathbf{u}_{ini}))\,\mathbf{v}\,dx - \int_0^t \int_{\mathcal{D}} \mathrm{div}(\phi(\mathbf{u}))\mathbf{v}\,dxdt = \int_0^t \int_{\mathcal{D}} \mathbf{F}\mathbf{v}\,dxdt$$

qui est bien équivalent à

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^t \int_{\mathcal{D}} (\partial_t \mathbf{b}(\mathbf{u}) - \mathrm{div}(\phi(\mathbf{u})))\,\mathbf{v}\,dxdt = \int_0^t \int_{\mathcal{D}} \mathbf{F}\mathbf{v}\,dxdt \\ \mathbf{b}(\mathbf{u}(0,\cdot)) = \mathbf{b}(\mathbf{u}_{ini}) \end{cases}$$

On établit ainsi l'équivalence, formelle, des deux problèmes (P_0) et $(P_{-\infty})$ pour les temps positifs.

Conditions initiales de type microscopique

Plaçons nous maintenant dans le cadre de l'homogénéisation et associons aux problèmes (P_0) et $(P_{-\infty})$ les problèmes à deux échelles (P_0^ε) et $(P_{-\infty}^\varepsilon)$ dans lesquels on suppose que $\mathbf{u}_\infty$ est, de la même manière que $\mathbf{u}^D$ et ϕ^N, indépendant de la variable d'espace rapide (*i.e.* indépendant de ε).

L'homogénéisation du problème $(P_{-\infty}^\varepsilon)$ se fait alors dans le cadre présenté au dessus (passage de $(P_{\mathrm{macro}}^\varepsilon)$ à (P_{macro}^H)) et nous donne le problème suivant

$$(P_{-\infty}^H) \begin{cases} \partial_t \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0) - \mathrm{div}(\phi^*(\mathbf{u}^0)) = \langle \mathbf{F}^\varepsilon \rangle \times \mathbb{1}_{(0;T)}(t) \\ \qquad\qquad + \delta_0(t)(\langle \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}_{ini}) \rangle - \mathbf{b}^*(\mathbf{u}_\infty)) \\ \qquad\qquad \text{sur} \quad]-\infty;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0(-\infty,\cdot)) = \mathbf{b}^*(\mathbf{u}_\infty) \quad \text{sur} \quad \mathcal{D} \\ \mathbf{u}^0 = \mathbf{u}^D \times \mathbb{1}_{(0;T)}(t) + \mathbf{u}_\infty \times \mathbb{1}_{(-\infty;0)}(t) \quad \text{sur} \quad]-\infty;T[\times\Gamma^D \\ \phi^*(\mathbf{u}) \cdot \nu = (\phi^N \cdot \nu) \times \mathbb{1}_{(0;T)}(t) \quad \text{sur} \quad]-\infty;T[\times\Gamma^N \end{cases}$$

Où l'on notera que, dans le second membre de l'équation d'évolution, on a écrit $\mathbf{b}^*(\mathbf{u}_\infty)$ au lieu de $\langle \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}_\infty) \rangle$. Ceci est possible car : d'une part on a $\mathbf{b}^*(\mathbf{u}_\infty) = \langle \mathbf{b}^0(\mathbf{u}_\infty) \rangle$; et d'autre part, comme $\mathbf{u}_\infty$ est supposé indépendant de ε, on a $\mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}_\infty) = \mathbf{b}^0(\mathbf{u}_\infty)$ (voir les développements de β_w^ε et de β_w^ε donnés en (9.11) et (9.15)).

De la même manière que $(P_{-\infty})$ correspond à (P_0) sur les temps positifs, $(P_{-\infty}^H)$ correspond, sur les temps positifs, au problème (P_0^H) défini par

$$(P_0^H) \begin{cases} \partial_t \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0) - \mathrm{div}(\phi^*(\mathbf{u}^0)) = \langle \mathbf{F}^\varepsilon \rangle \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\mathcal{D} \\ \mathbf{b}^*(\mathbf{u}^0(0,x)) = \langle \mathbf{b}^\varepsilon(\mathbf{u}_{ini}(x, x/\varepsilon)) \rangle \quad \text{sur} \quad \mathcal{D} \\ \mathbf{u}^0(t,x) = \mathbf{u}^D(t,x) \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^D \\ \phi^*(\mathbf{u}^0(t,x)) = \phi^N(t,x) \quad \text{sur} \quad]0;T[\times\Gamma^N \end{cases}$$

Finalement, on dira que le problème (P_0^H) est l'homogénéisé du problème (P_0^ε).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

On notera que la seule différence entre les problèmes $(P^{\varepsilon}_{\text{macro}})$ et (P^{ε}_{0}) réside dans la dépendance, ou non, de la condition initiale, $\mathbf{u}_{ini}$, à la variable d'espace rapide. Dans le premier cas, la condition initiale "homogénéisée" est $\mathbf{b}^*(u_{ini})$ tandis que dans le second, plus général, elle devient $\langle \mathbf{b}^{\varepsilon}(u_{ini}) \rangle$.

Remarque 5. *Dans cette section, on a utilisé des notations du type "$\langle \mathbf{F}^{\varepsilon} \rangle$" qui sont fausses en toute rigueur. Il aurait en effet fallu définir la fonction P-périodique $\mathbf{F}(y)$ de sorte que $\mathbf{F}^{\varepsilon} \equiv \mathbf{F}(x/\varepsilon)$. Ceci nous aurait permis de parler, de façon plus correcte, de la quantité "$\langle \mathbf{F} \rangle$". Un des soucis majeur de l'abus de notation "$\langle \mathbf{F}^{\varepsilon} \rangle$" étant bien sûr de faire apparaître l'exposant $\cdot^{\varepsilon}$ sur une quantité qui ne dépend pas de ε.*

9.2 Validation numérique

On s'intéresse à l'application du processus d'homogénéisation que l'on vient de présenter à une configuration complexe : l'exercice Couplex-Gaz, qui est présenté et traité de manière "classique" au chapitre 8. Plus précisément, on propose ici un équivalent homogène pour la zone des colis, le reste de la zone ouvragée et la zone rocheuse restant inchangé.

Pour des raisons de commodité au niveau de la résolution numérique du problème homogénéisé, on modifie ici très légèrement l'exercice Couplex-Gaz original en réduisant la perméabilité du jeu, le reste de l'exercice étant par ailleurs repris à l'identique.

Il s'agit donc, dans un premier temps, de définir le motif périodique de la zone à homogénéiser pour ensuite construire les grandeurs effectives correspondant à cette zone. On présentera enfin les résultats de la simulation où la zone de colis est remplacée par son équivalent effectif (problème *homogénéisé*), résultats que l'on comparera avec ceux de la simulation où la zone de colis hétérogène est conservée (problème *détaillé*).

9.2.1 Définition du problème

On considère l'exercice Couplex-Gaz tel qu'il est défini au chapitre 8, à la différence près que la perméabilité du jeu est réduite de $10^{-12}\,m^2$ à $10^{-16}\,m^2$; le tableau 9.1 reprend les données du tableau 8.3 de l'exercice original en soulignant cette modification.

Param.	Matériaux						
	Colis	Béton de colis	Jeux	Béton de rempl.	Zone fract.	Zone endo.	COX
k_v (m^2)	10^{-15}	10^{-19}	10^{-16}	10^{-18}	$5\ 10^{-16}$	$5\ 10^{-18}$	$5\ 10^{-21}$
k_h (m^2)	$k_h = k_v$						$5\ 10^{-20}$
Φ (%)	25	15	100	30	16	15	15
P_r (Pa)	$3\ 10^4$	$2\ 10^6$	$5\ 10^4$	$2\ 10^6$	$2\ 10^6$	$5\ 10^6$	$15\ 10^6$
n $(-)$	1.5	1.54	1.5	1.54	1.5	1.5	1.49
$S_{l,res}$ (%)	1	1	1	1	10	20	40
$S_{g,res}$ (%)	0	0	0	0	0	0	0

TABLE 9.1 – Valeurs des caractéristiques du milieu poreux selon le matériau. Modification de la perméabilité du jeu par rapport à l'exercice Couplex-Gaz d'origine ($10^{-16}\,m^2$ au lieu de $10^{-12}\,m^2$).

La zone de stockage de l'exercice Couplex-Gaz présente une périodicité qui nous permet de mettre en œuvre le processus d'homogénéisation périodique développé dans la section précédente. La figure 9.1, qui reproduit le détail de la zone ouvragée de la géométrie du problème (voir la figure 8.1 pour la géométrie complète), met en évidence cette périodicité.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

La zone des colis peut en effet être décrite comme un pavage 4×4 d'une cellule élémentaire P constituée d'un colis primaire entouré de béton de colis et bordé d'un jeu vertical. On notera que cette zone strictement périodique ne recouvre pas entièrement l'ensemble (colis primaire + béton de colis + jeu) et qu'elle est donc entourée d'un jeu résiduel.

Le problème que l'on veut simuler est donc identique à l'exercice Couplex-Gaz en dehors de la zone périodique. La zone périodique (que l'on nommera aussi zone homogénéisée) est quant à elle remplacée par son équivalent homogénéisé, de même que les termes sources et les conditions initiales sur cette zone. La zone homogénéisée étant disjointe des frontières du domaine, les conditions aux limites restent inchangées.

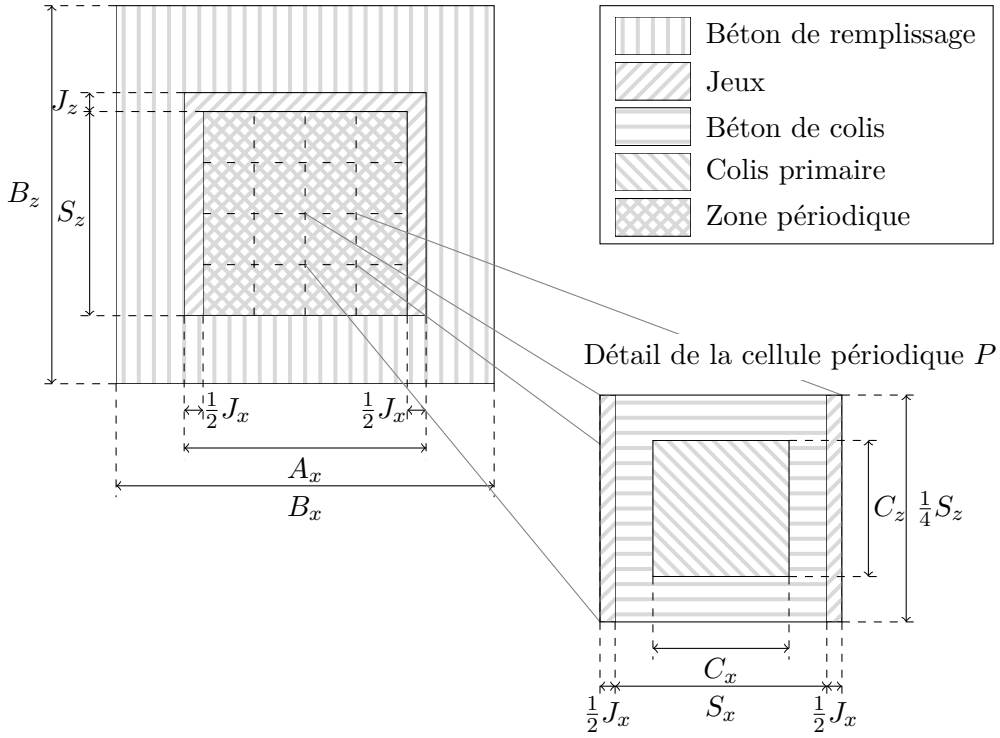


FIGURE 9.1 – Homogénéisation de Couplex-Gaz : description de la structure périodique des colis. (détail de la zone ouvragée)

Modification des termes sources

Compte tenu des équations effectives (9.35) et (9.40) et de la définition des termes sources de l'exercice Couplex-Gaz donnée en section 8.1.5, les termes de sources volumiques homogénéisés sont donnés, pour $t > 0$ et $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, par

$$\mathcal{F}^w(t,\mathbf{x}) = 0 \; kg/m^3/an \quad \text{et}$$

$$\mathcal{F}^h(t,\mathbf{x}) = \frac{M^h}{|B_{hom}|}\left(Q^{h,1}\mathbb{1}_{[0,T_1]}(t) + Q^{h,2}\mathbb{1}_{[T_1,T_2]}(t)\right)\mathbb{1}_{B_{hom}}(\mathbf{x})$$

Avec B_{hom} la partie du domaine $\mathcal{D}$ correspondant à la zone homogénéisée ("zone périodique" sur la figure 9.1), $|B_{hom}|$ notant la mesure B_{hom}, et avec, comme en section 8.1.5, M^h la masse molaire de l'hydrogène et

$$Q^{h,1} = 100 \; mol/an/m \; , \; Q^{h,2} = 8 \; mol/an/m \; ,$$
$$T_1 = 500 \; ans \quad \text{et} \quad T_2 = 10^4 \; ans$$

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Modification des conditions initiales

En s'appuyant sur la discussion faite en section 9.1.5 et en reprenant les valeurs numériques des conditions initales de l'exercice Couplex-Gaz (voir la section 8.1.4), les conditions initiales du problème homogénéisé deviennent :

– Dans la zone rocheuse (COX + zone endommagée + zone fracturée),

$$R_s = 0 \quad \text{et} \quad p_l = p_{bot} + (p_{top} - p_{bot})\frac{z}{L_z}$$

– Dans le béton de remplissage,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.3$$

– Dans le jeu résiduel,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.9$$

– Dans la zone homogénéisée,

$$p_g = 10^5\ Pa \quad \text{et} \quad S_g = 0.7782$$

Caractéristiques effectives de la zone homogénéisée

En suivant les développements de la section 9.1.4 et en reprenant les valeurs numériques des caractéristiques des matériaux (voir le tableau 9.1) présents dans la cellule périodique P, on obtient les valeurs numériques des caractéristiques effectives de la zone homogénéisée : la porosité Φ_{hom}, la perméabilité absolue $\mathbb{K}_{hom}$, la loi de pression capillaire $P_{c,hom}(S_g)$, les perméabilités relatives $k_{r,l,hom}(S_g)$ et $k_{r,g,hom}(R_s, S_g)$ et la tortuosité $\tau_{hom}(R_s, S_g)$.

– La porosité effective, Φ_{hom}, s'obtient par un simple calcul de moyenne (voir la relation (9.41)) qui donne

$$\Phi_{hom} = 0.268$$

– La perméabilité absolue effective, $\mathbb{K}_{hom}$, se calcule via la résolution du problème local (9.43). Dans la base canonique $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)$, on obtient le tenseur, diagonal, suivant :

$$\mathbb{K}_{hom} = \begin{bmatrix} k_h & 0 \\ 0 & k_v \end{bmatrix}_{(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)}$$

avec

$$k_h = 1.013\ 10^{-18}\ m^2 \quad \text{et} \quad k_v = 5.959\ 10^{-18}\ m^2$$

– La loi de pression capillaire effective, $P_{c,hom}(S_g)$, définie par les relations (9.44) et (9.45), est tracée en figure 9.2

– Les tenseurs effectifs de perméabilité relative de la phase liquide, $k_{r,l,hom}(S_g)$, et de la phase gazeuse, $k_{r,g,hom}(R_s, S_g)$, sont définis par la relation (9.46). Numériquement, on obtient des tenseurs qui sont diagonaux dans la base canonique $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)$:

$$k_{r,l,hom}(S_g) = \begin{bmatrix} k_{r,l,hom,h}(S_g) & 0 \\ 0 & k_{r,l,hom,v}(S_g) \end{bmatrix}_{(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)}$$

$$k_{r,g,hom}(R_s, S_g) = \begin{bmatrix} k_{r,g,hom,h}(R_s, S_g) & 0 \\ 0 & k_{r,g,hom,v}(R_s, S_g) \end{bmatrix}_{(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)}$$

Le résultat du calcul des fonctions $k_{r,l,hom,h}(S_g)$, $k_{r,l,hom,v}(S_g)$ est représenté en figure 9.3 et celui des fonctions $k_{r,g,hom,h}(R_s, S_g)$ et $k_{r,g,hom,v}(R_s, S_g)$ en figure 9.4.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

– Le tenseur de tortuosité effectif, $\tau_{hom}(R_s, S_g)$, est défini par la relation (9.47). Numériquement, on obtient un tenseur qui est diagonal dans la base canonique $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)$:

$$\tau_{hom}(R_s, S_g) = \begin{bmatrix} \tau_{hom,h}(R_s, S_g) & 0 \\ 0 & \tau_{hom,v}(R_s, S_g) \end{bmatrix}_{(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z)}$$

Le résultat du calcul des fonctions $\tau_{hom,h}(R_s, S_g)$, $\tau_{hom,v}(R_s, S_g)$ est représenté en figure 9.5

Sur les figures 9.4 et 9.5, les coefficients représentés sont paramétrés, en plus de la saturation S_g, par la concentration d'hydrogène R_s. Contrairement à la saturation, le paramètre R_s n'est pas borné et l'on a donc tracé ici les fonctions $k_{r,g,hom,h}(R_s, S_g)$, $k_{r,g,hom,v}(R_s, S_g)$, $\tau_{hom,h}(R_s, S_g)$ et $\tau_{hom,v}(R_s, S_g)$ pour une plage représentative du paramètre R_s au vu des résultats numériques du chapitre 8. On peut voir que ce paramètre a peu d'influence dans la plage considérée, en particulier pour les fonctions $k_{r,g,hom,v}(R_s, S_g)$, $\tau_{hom,h}(R_s, S_g)$ et $\tau_{hom,v}(R_s, S_g)$.

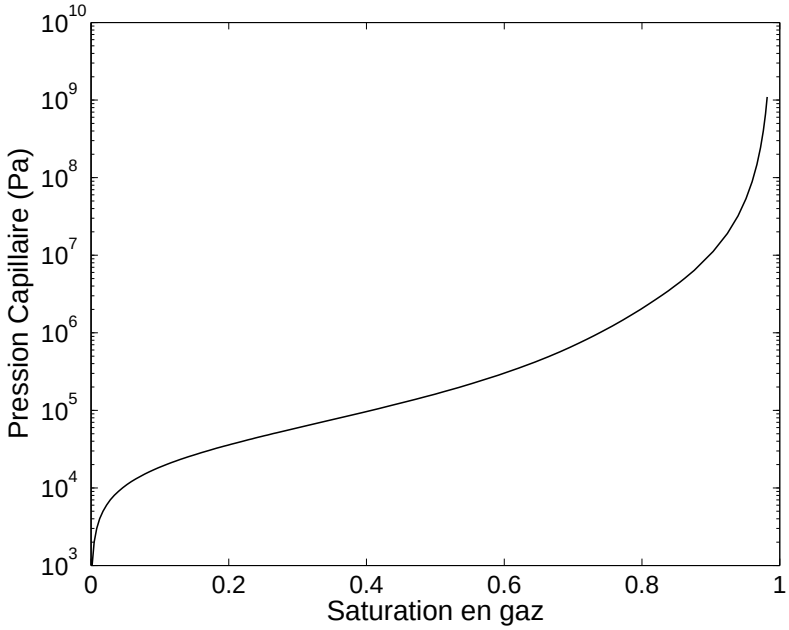


FIGURE 9.2 – Loi de pression capillaire effective de la zone de colis homogénéisée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

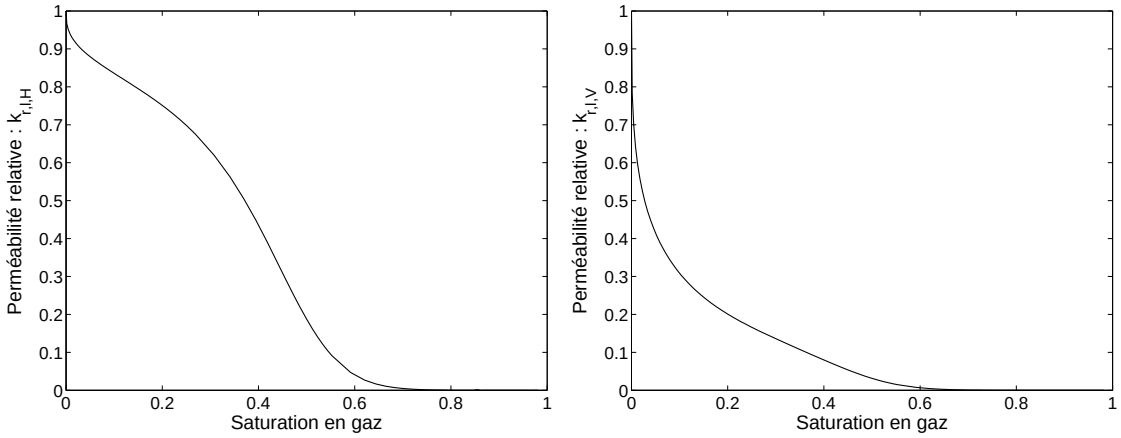


FIGURE 9.3 – Loi de perméabilité relative effective de la phase liquide de la zone de colis homogénéisée

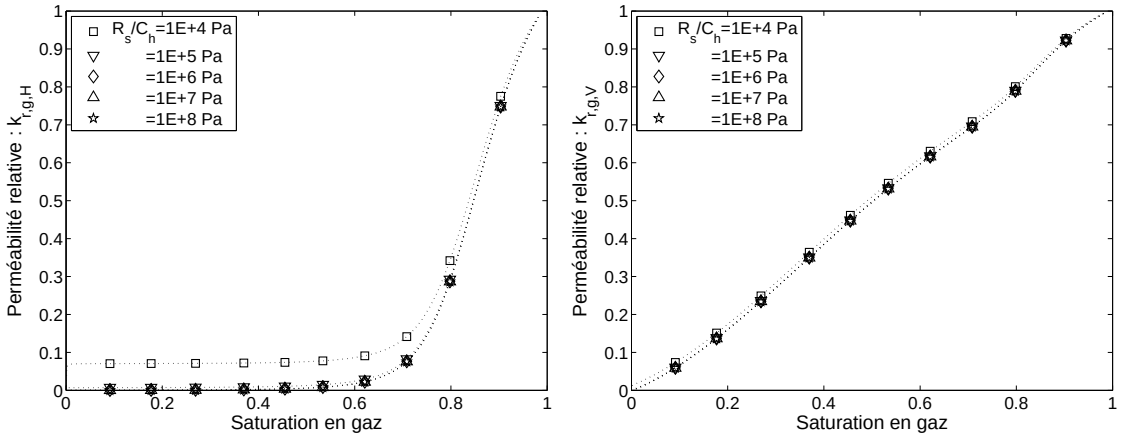


FIGURE 9.4 – Loi de perméabilité relative effective de la phase gazeuse de la zone de colis homogénéisée

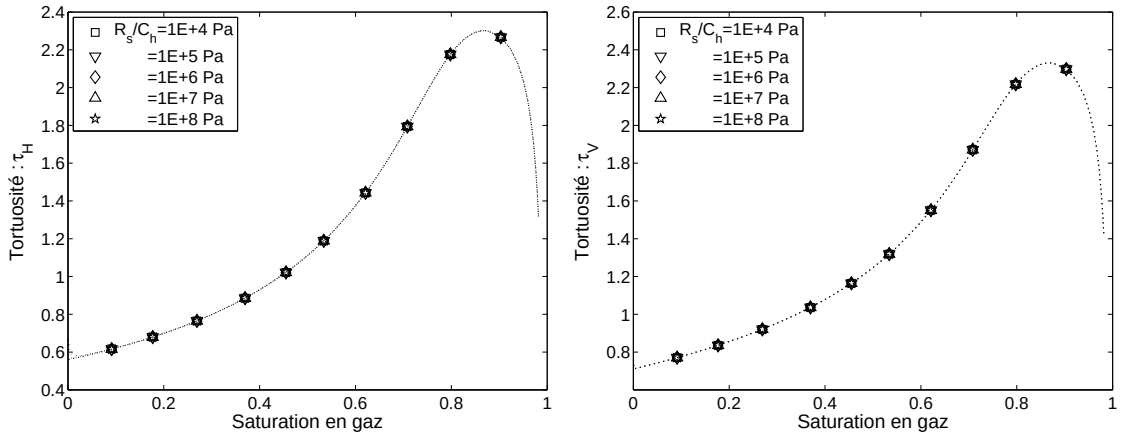


FIGURE 9.5 – Tortuosité effective de la zone de colis homogénéisée

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

9.2.2 Résultats numériques

On présente maintenant les résultats des simulations du problème *détaillé* et du problème *homogénéisé*. Le problème détaillé est identique au problème traité au chapitre 8 à la différence près que les caractéristiques du milieu poreux sont celles définies dans le tableau 9.1 (modification de la perméabilité du jeu). Dans le problème homogénéisé, la zone périodique (voir la figure 9.1) est remplacée par son équivalent homogénéisé, de même que les termes sources et les conditions initiales sur cette zone (voir la section 9.2.1).

Compte tenu des résultats obtenus en chapitre 8 sur l'exercice Couplex-Gaz d'origine, on choisit de mener les deux simulations de $t = 0an$ à $t = t_{final} = 20000ans$. Le temps final, t_{final}, se situe ainsi après l'arrêt de la production d'hydrogène mais avant la resaturation en liquide des colis. On utilise le même maillage et les mêmes pas de temps pour les deux simulations. Le maillage utilisé présente des pas d'espace allant de $0.05\,m$ dans la zone de stockage à $8\,m$ dans les zones les plus éloignés du stockage ; le pas de temps utilisé varie de $10^{-3}\,ans$ à $200\,ans$.

Pour présenter ces deux simulations, on reprend les indicateurs définis pour l'exercice Couplex-Gaz en section 8.1.6 et l'on compare systématiquement sur chaque figure les résultats obtenus pour le problème détaillé et le problème homogénéisé. Ainsi, la position du front de saturation pour les deux simulations est présentée en figure 9.6, les flux d'hydrogène sortant en figure 9.7, la trace des observables en différents points d'observation (voir la section 8.1.6 pour la définition de ces points) en figure 9.8 et les profils des observables en différents temps d'observation en figures 9.9, 9.10, 9.11, 9.12, 9.13 et 9.14.

Rappelons que, comme dans le chapitre 8, dans toutes ces figures où il est fait mention de la pression du gaz, il s'agit en toute rigueur de la *pression d'équilibre thermodynamique du gaz* telle qu'elle est définie dans la remarque 4 (voir page 91). La *pression d'équilibre thermodynamique du gaz* est une quantité qui est proportionnelle à la concentration d'hydrogène dissout dans le liquide et qui correspond exactement à la pression de la phase gazeuse quand cette dernière existe.

Analyse des résultats

Notons tout d'abord que les indicateurs pour le problème détaillé sont tout à fait similaires à ceux obtenus dans le chapitre 8 pour l'exercice Couplex-Gaz d'origine. La modification de la perméabilité du jeu n'a ainsi que peu d'influence sur ces indicateurs et l'on se réfèrera donc à la section 8.2 pour une analyse de ces résultats.

Ce qui nous intéresse ici n'est en effet pas tant de comprendre les résultats de simulation du problème détaillé ou homogénéisé pour eux-mêmes que de distinguer comment ces résultats diffèrent ou se confondent pour les deux problèmes.

Dans un premier temps, on peut comparer les états initiaux, à $t = 0\,an$, du système pour les deux problèmes sur les figures 9.9, 9.11 et 9.13. On y retrouve le fait que ces états initiaux sont identiques hors de la zone des colis mais diffèrent à l'intérieur, celui du problème homogénéisé étant spatialement uniforme dans cette zone. De plus, on peut voir sur les figures 9.9 et 9.13 la présence du jeu résiduel au-dessus de la zone homogénéisée.

Si l'on regarde des indicateurs globaux comme la position du front de saturation (voir la figure 9.6) ou les flux d'hydrogène sortant (voir la figure 9.7), on constate une très grande similitude entre les deux simulations. La seule différence notable a lieu pour le flux d'hydrogène à travers Γ_{ouv} dans les temps "courts" (inférieurs à $10^{-2}\,ans$).

Pour analyser la figure 9.8, il faut se rappeler la définition des points d'observation (les points A, B, C, D, E, F et G définis en section 8.1.6). En particulier, ces points s'éloignent

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

progressivement de la zone de colis depuis le centre vers le haut du domaine : les points A et B se trouvent dans la zone homogénéisée, le point C est dans le jeu résiduel, à $0.1\,m$ du bord de la zone homogénéisée, et les points D, E, F et G se situent entre $0.9\,m$ et $7.9\,m$ du bord de la zone homogénéisée. Pour ce qui concerne la pression du gaz, on n'observe pas de différences entre les problèmes détaillé et homogénéisé. Pour la pression du liquide, on observe que sa valeur aux points D, E, F et G est la même sur tout le temps de simulation pour les deux problèmes, tandis que pour les points A, B et C les deux simulations ne coïncident que pour les temps au delà de $t \approx 300$ ou $400\,ans$. Pour la saturation en gaz, on fait le même constat qu'avec la pression du liquide pour les points C, D, E, F et G. Pour les points A et B l'évolution de la saturation en gaz est différente dans les deux problèmes.

Les observations faites pour la figure 9.8 se retrouve dans les figures 9.9, 9.10, 9.11, 9.12, 9.13 et 9.14. A l'extérieur de la zone homogénéisée : les profils de pression du liquide, de pressions du gaz et de saturation en gaz des deux simulations coïncident et ceci d'autant mieux que l'on avance dans le temps ou que l'on s'éloigne de la zone homogénéisée. A l'intérieur de la zone homogénéisée : la pression du gaz des deux simulations coïncident en tout temps ; pour la pression du liquide, les différences s'estompent après une durée de moins de $5000\,ans$; mais le profil de la saturation en gaz du problème détaillé présente en tout temps sa structure périodique là où le profil de saturation pour le problème homogénéisé ne présente aucune oscillation.

Il apparaît ainsi que la solution du problème homogénéisé est assez proche de celle du problème détaillé et ce, même dans des régions relativement proches ($\approx 1\,m$) de la zone homogénéisée. Ceci est de plus d'autant plus vérifié que l'on avance dans le temps. Dans la zone homogénéisée, la solution en pression du liquide et concentration d'hydrogène dissout, (p_l, R_s), (rappelons que la pression d'équilibre thermodynamique du gaz est définie comme $p_g^{thermo} = R_s/C_h$) du problème homogénéisé devient, après un certain temps (quelques milliers d'années), similaire à celle du problème détaillé. Par contre, la saturation en gaz (qui est construite comme une fonction de p_l et de R_s) pour chaque problème diffère dans cette zone : le problème homogénéisé ne décrit jamais les oscillations de la saturation du problème détaillé mais seulement un comportement moyen (voir en particulier la définition de la saturation en gaz effective donnée par l'équation (9.44), page 129).

On démontre ainsi numériquement la validité de notre démarche d'homogénéisation des écoulements diphasiques eau/hydrogène en milieux poreux pour une configuration typique d'un site de stockage géologique de déchets radioactifs. Pour les besoins de la comparaison, la simulation du problème homogénéisé présentée ci-dessus utilise un maillage conçu initialement pour la géométrie du problème détaillé. Au vu des conclusions positives que l'on vient d'obtenir, on peut désormais concevoir des maillages moins coûteux pour la simulation du problème homogénéisé.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

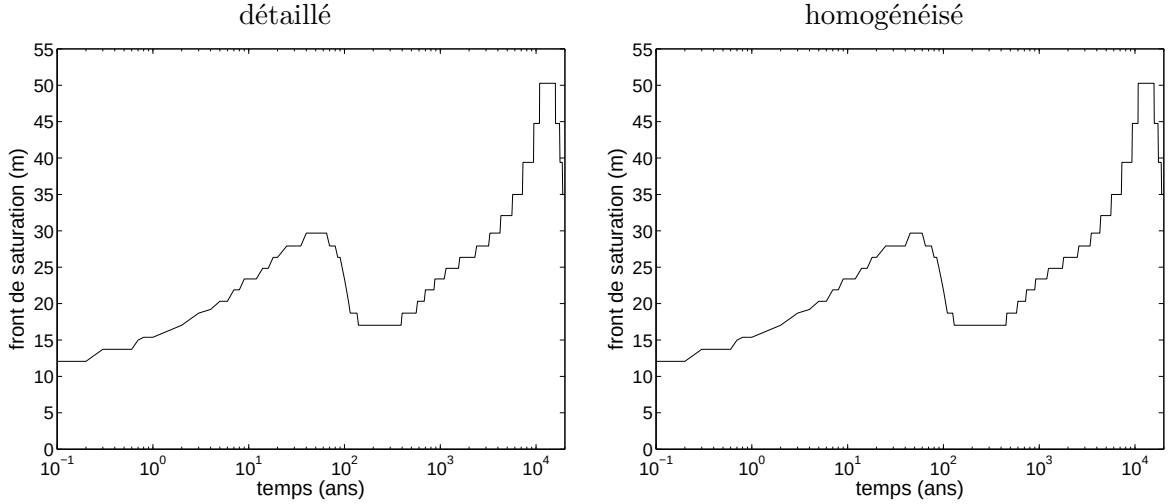


FIGURE 9.6 – Évolution temporelle de la position du front de saturation le long de la demi-droite $z = 65\,m$ et $x > 100\,m$, mesurée comme la distance entre le front et l'origine de la demi-droite ($x = 100\,m, z = 65\,m,$). Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

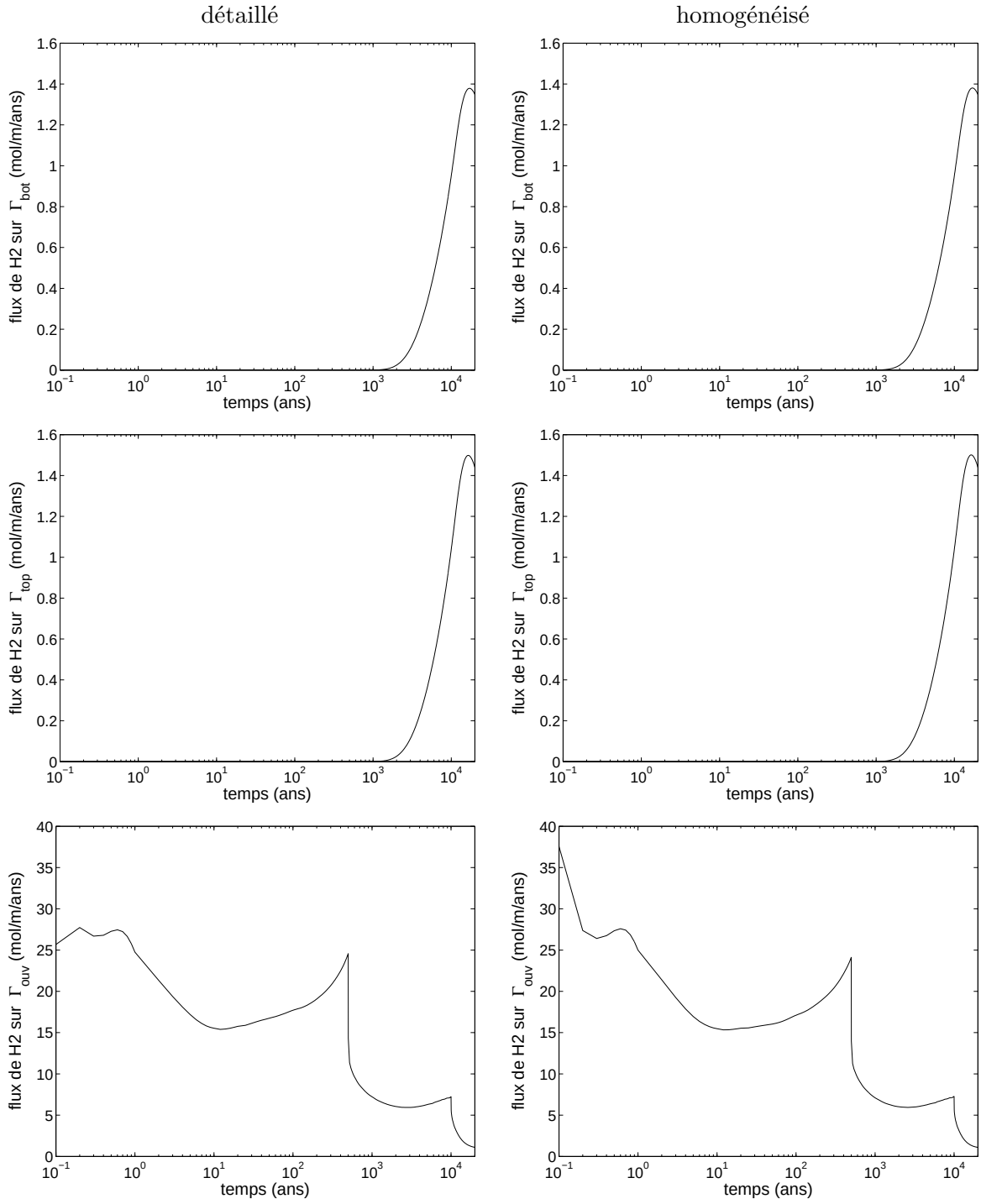


FIGURE 9.7 – Évolution temporelle des flux d'hydrogène à travers : le bas du domaine, Γ_{bot}, le haut du domaine, Γ_{top} et l'interface entre les zones ouvragée et rocheuse, Γ_{ouv}. Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

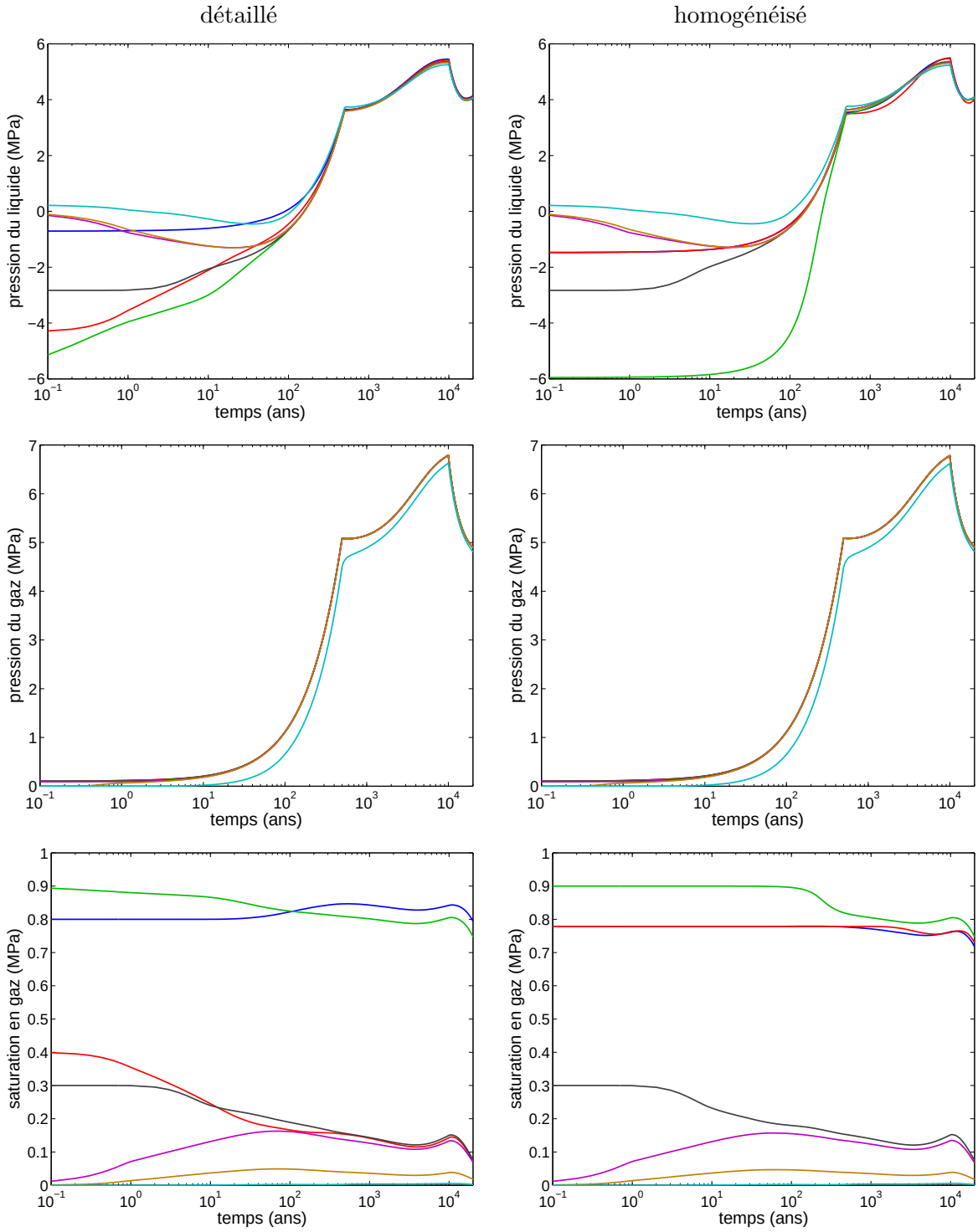


FIGURE 9.8 – Évolution temporelle de la pression du liquide, de la pression du gaz et de la saturation en gaz aux différents points d'observation : – A, – B, – C, – D, – E, – F, – G. Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

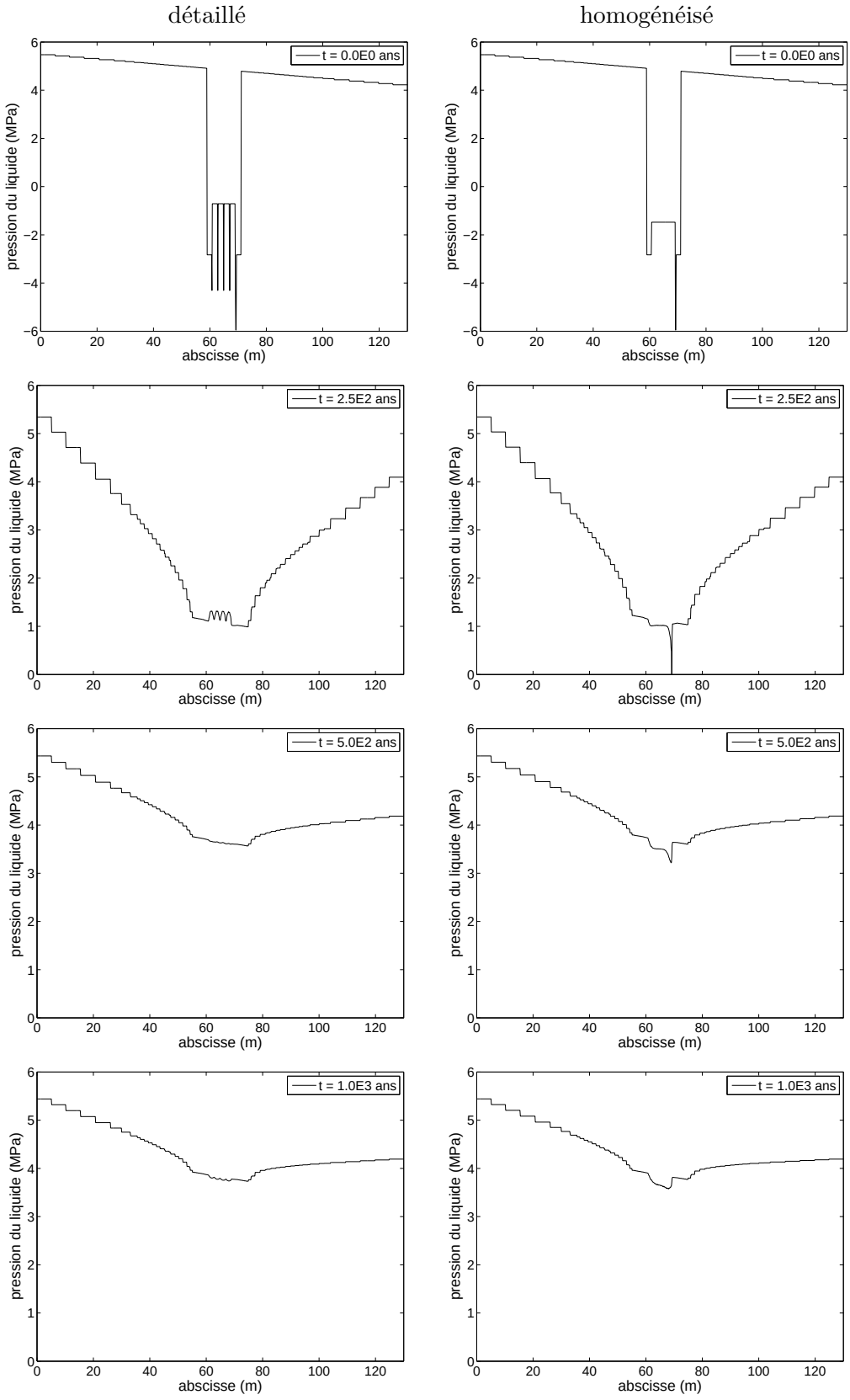


FIGURE 9.9 – Profils selon z de la pression du liquide en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de $0\,ans$ à $1000\,ans$ Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

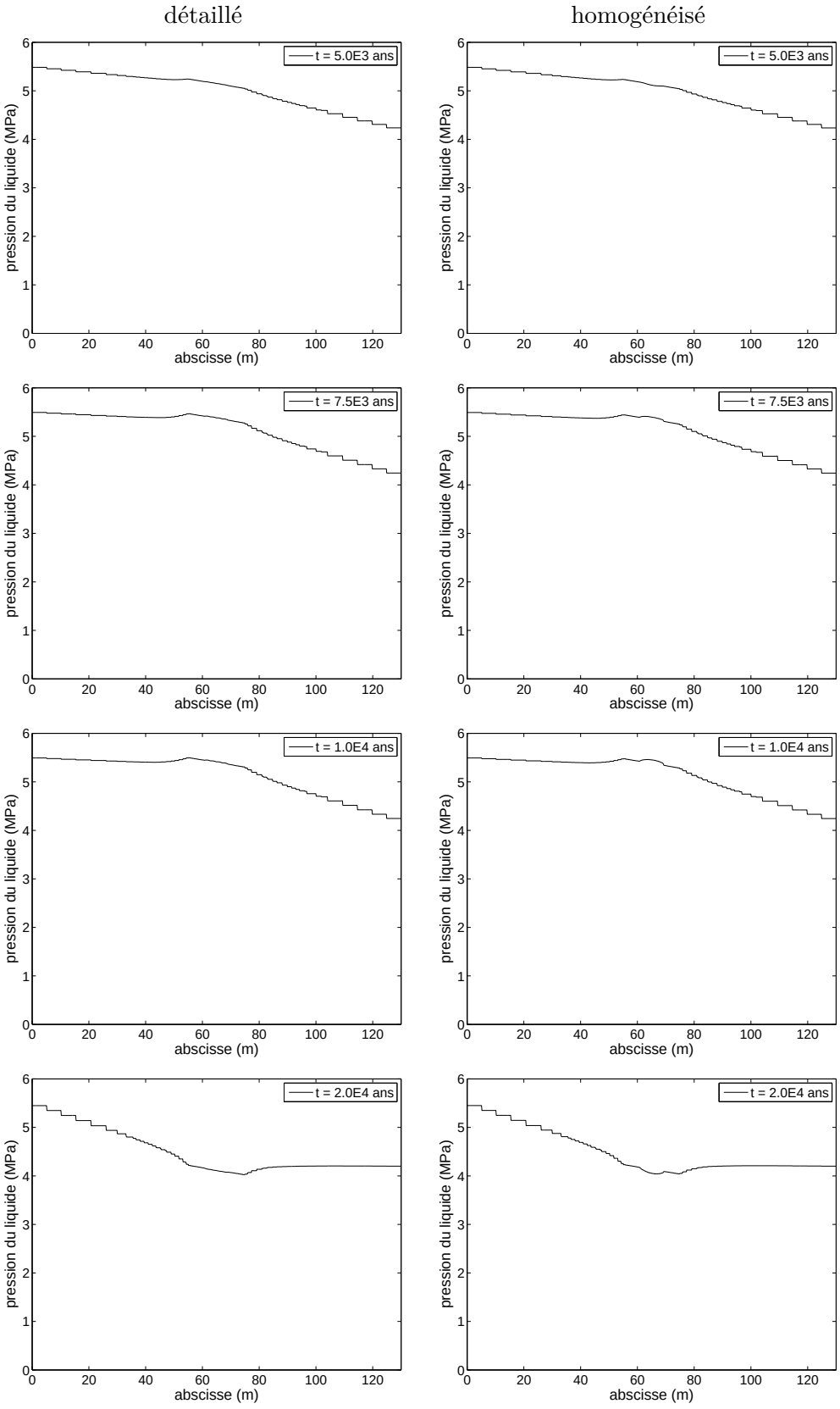


FIGURE 9.10 – Profils selon z de la pression du liquide en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de $5000\,ans$ à $20000\,ans$ Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

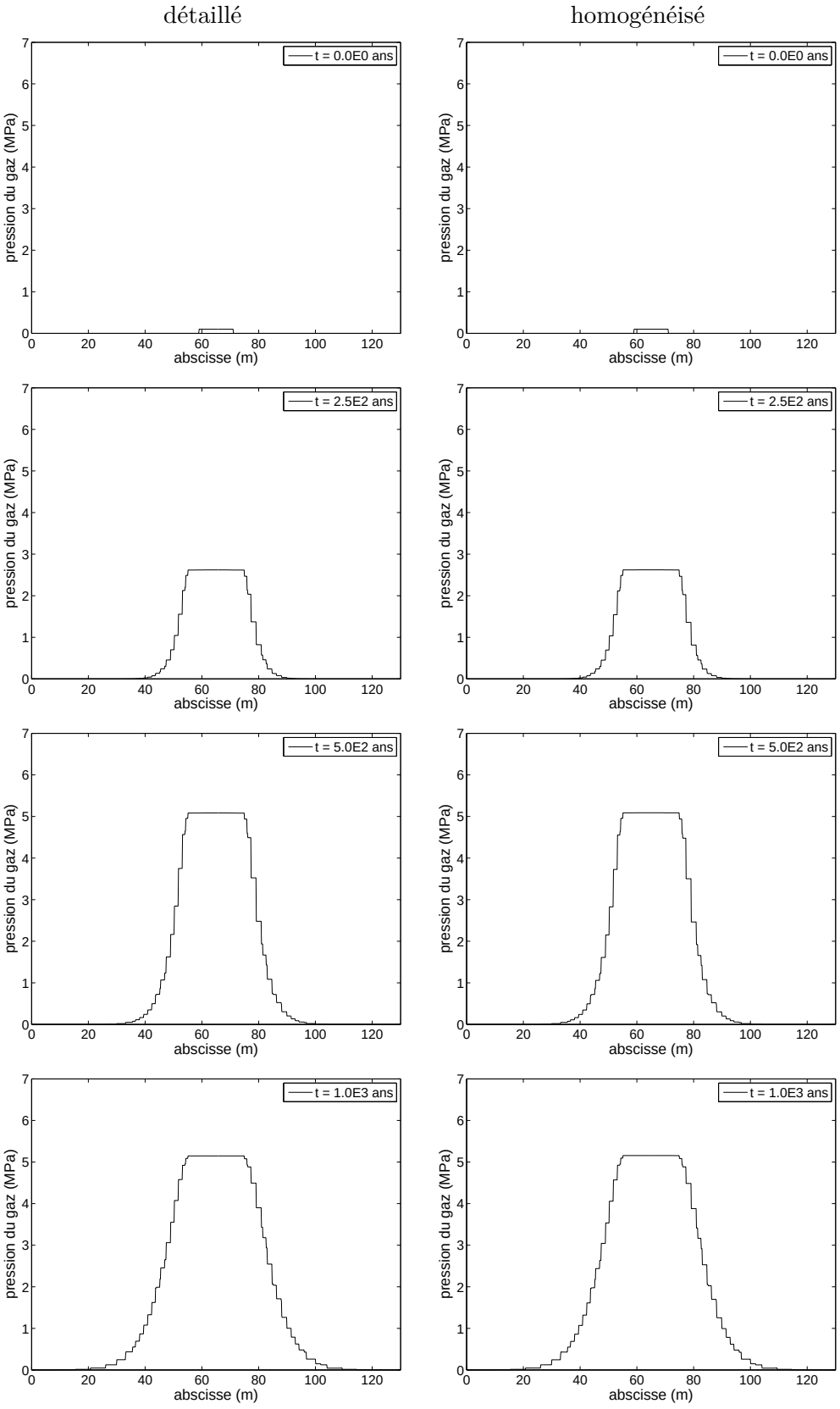


FIGURE 9.11 – Profils selon z de la pression du gaz en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de $0\,ans$ à $1000\,ans$ Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

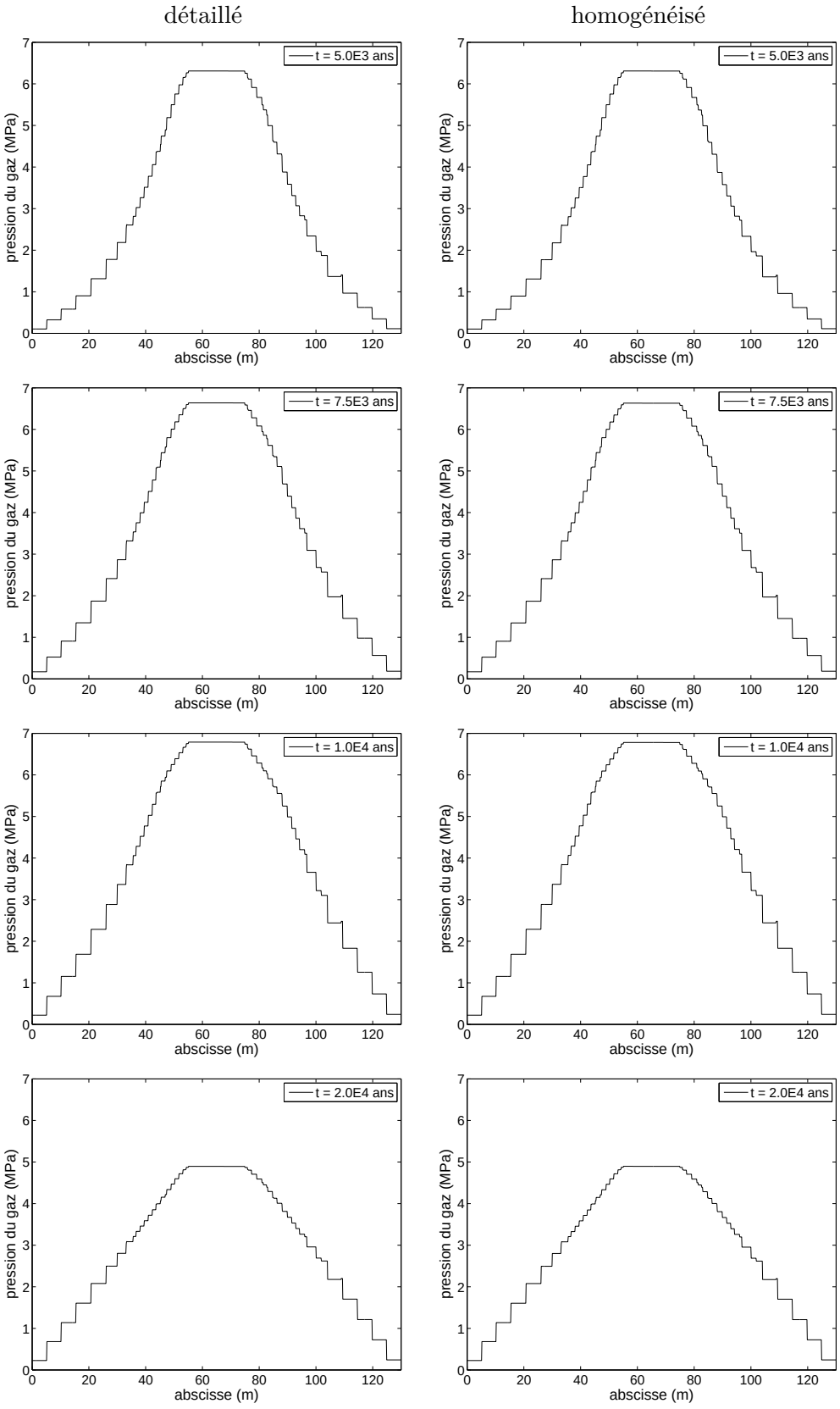


FIGURE 9.12 – Profils selon z de la pression du gaz en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de $5000\,ans$ à $20000\,ans$ Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

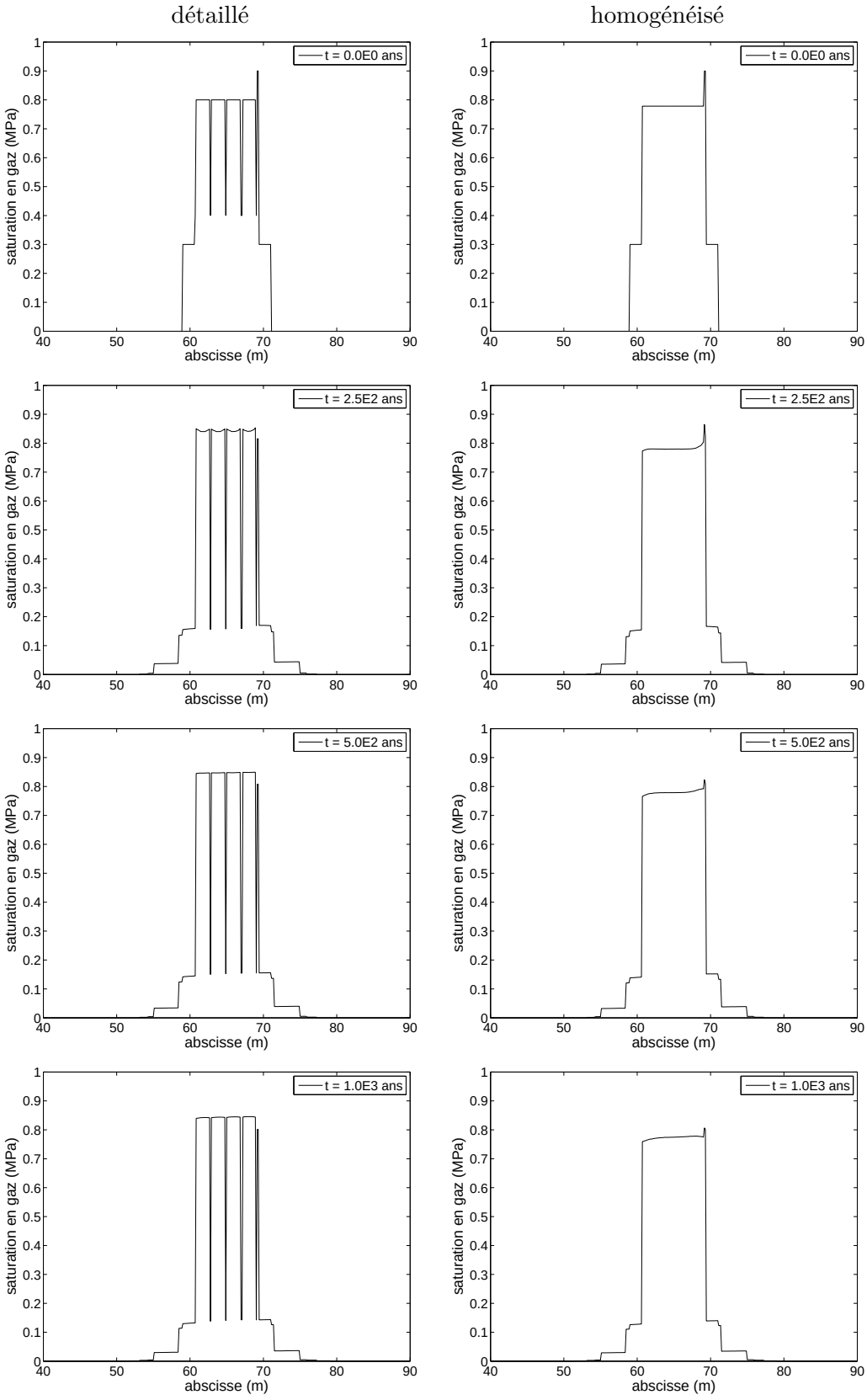


FIGURE 9.13 – Profils selon z de la saturation en gaz en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de $0\,ans$ à $1000\,ans$ Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

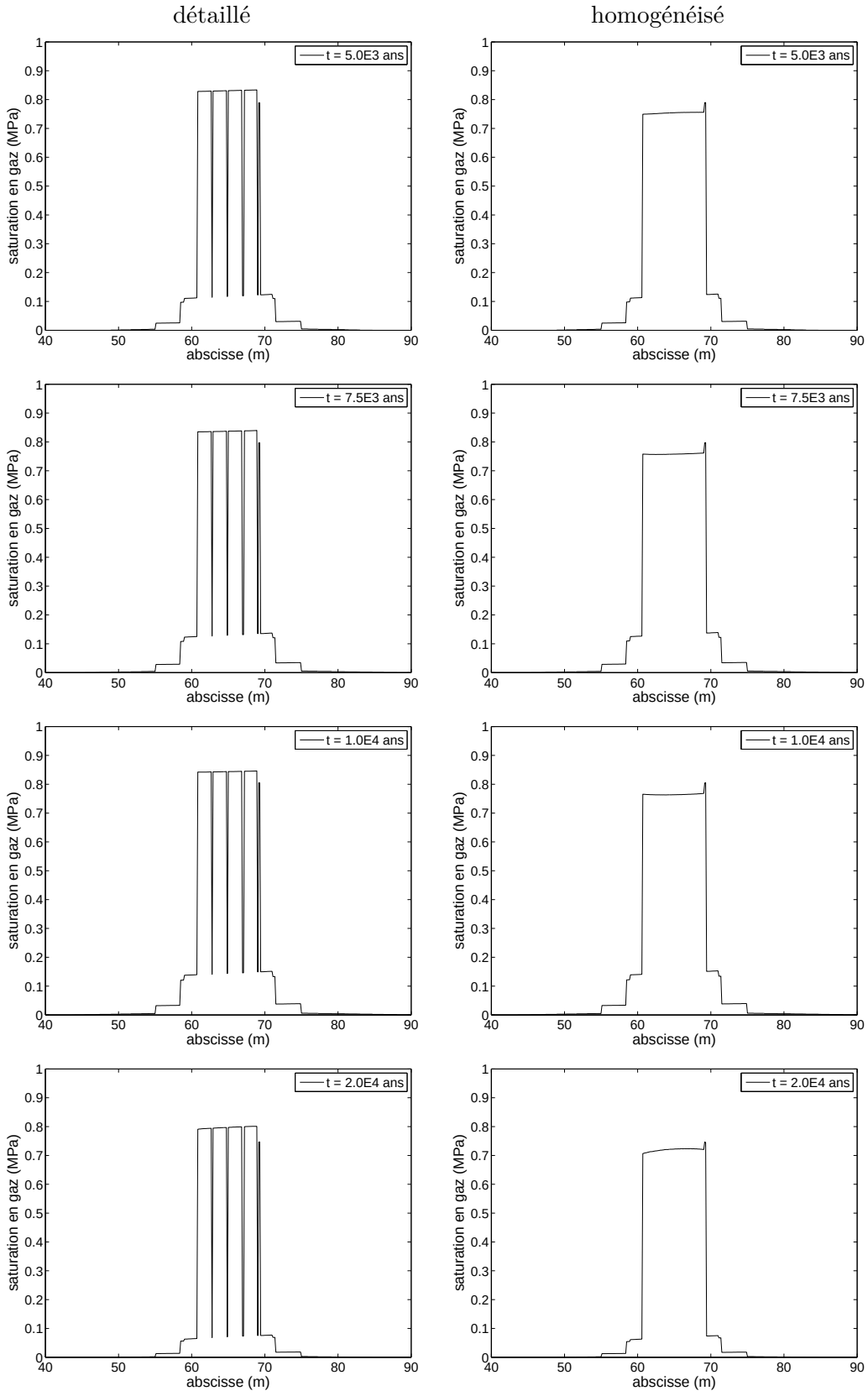


FIGURE 9.14 – Profils selon z de la saturation en gaz en $x = 130\,m$ aux différents temps d'observation de $5000\,ans$ à $20000\,ans$ Comparaison entre le problème détaillé (à gauche) et le problème homogénéisé (à droite).

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Bibliographie

[ABJ06] B. Amaziane, A. Bourgeat, and M. Jurak. Effective macrodiffusion in solute transport through heterogeneous porous media. *Multiscale Model. Simul.*, 5(1) :184–204, 2006.

[AD85] H.W. Alt and E. DiBenedetto. Nonsteady flow of water and oil through inhomogeneous porous media. *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci.(4)*, 12(3) :335–392, 1985.

[AKM90] S. Antontsev, A. Kazhikhov, and V. Monakhov. Boundary value problems in mechanics of nonhomogeneous fluids. *Studies in Mathematics and its Applications*, 22, 1990.

[AL83] H.W. Alt and S. Luckhaus. Quasilinear elliptic-parabolic differential equations. *Mathematische Zeitschrift*, 183(3) :311–341, 1983.

[All89] G. Allaire. Homogenization of the Stokes flow in a connected porous medium. *Asymptotic Anal.*, 2(3) :203–222, 1989.

[AND] ANDRA. http ://www.gdrmomas.org/ex_qualifications.html#couplex.

[Bea72] J. Bear. *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, New York, 1972.

[BGM04] A. Bourgeat, O. Gipouloux, and E. Marusic. Modeling of an underground waste disposal site by upscaling. *Mathematical Modelling in Applied Sciences*, 27(4) :381–403, 2004.

[BGMP02] A. Bourgeat, O. Gipouloux, and E. Marusic-Paloka. Mathematical modelling of an array of underground waste containers. *C.R.Acad. Sc. Mecanique*, 330 :371–376, 2002.

[BJP03] A. Bourgeat, M. Jurak, and A. L. Piatnitski. Averaging a transport equation with small diffusion and oscillating velocity. *Math. Methods Appl. Sci.*, 26(2) :95–117, 2003.

[BJS09] A. Bourgeat, M. Jurak, and F. Smaï. Two-phase, partially miscible flow and transport modeling in porous media ; application to gas migration in a nuclear waste repository. *Computational Geosciences*, 13 :29–42, 2009.

[BK96] A. Yu. Beliaev and S. M. Kozlov. Darcy equation for random porous media. *Comm. Pure Appl. Math.*, 49(1) :1–34, 1996.

[BLP78] A. Bensoussan, J.L. Lions, and G. Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*, volume 5 of *Studies in Mathematics and its Applications*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1978.

[BM04] A. Bourgeat and E. Marusic. An homogenized model of an underground waste repository including a disturbed zone. *SIAM J. on Multiscale Modeling and Simulation*, 3(4) :918–939, 2004.

[BP08] A. Bourgeat and A.L. Piatnitski. Homogenization of a diffusion convection equation, with random source terms periodically distributed. *Preprint Institut Camille Jordan*, 2008.

[Bri49] H.C. Brinkman. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. *Applied Scientific Research*, 1(1) :27–34, 1949.

[CEA] CEA. http ://www-cast3m.cea.fr.

[CH74] D.R. Cox and D.V. Hinkley. *Theoretical Statisics*. Chapmann and Hall, 1974.

[Che01] Z. Chen. Degenerate Two-Phase Incompressible Flow I. Existence, Uniqueness and Regularity of a Weak Solution. *Journal of Differential Equations*, 171(2) :203–232, 2001.

[CHM06] Z. Chen, G. Huan, and Y. Ma. *Computational methods for multiphase flows in porous media*. Society for Industrial Mathematics, 2006.

[CJ86] G. Chavent and J. Jaffre. *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation : single phase, multiphase, and multicomponent flows through porous media*. North Holland, 1986.

[CR87] M. Collin and A. Rasmuson. Mathematical modeling of water and oxygen transport in layered soil covers for deposits of pyritic mine tailings. *Licenciate Treatise. Royal Institute of Technology. Department of Chemical Engineering. S-10044 Stockholm, Sweden*, 1987.

[Cur60] J.A. Currie. Gaseous diffusion in porous media Part 1.- A non-steady state method. *British Journal of Applied Physics*, 11(8) :314–317, 1960.

[Dar56] H. Darcy. Les fontaines publiques de la ville de Dijon. *Dalmont, Paris*, 647, 1856.

[dM81] G. de Marsily. *Hydrogéologie quantitative*. Masson, 1981.

[Doo53] J.L. Doob. *Stochastic Processes*. Wiley Publications in Statistics, 1953.

[ESP75] H. I. Ene and E. Sánchez-Palencia. Équations et phénomènes de surface pour l'écoulement dans un modèle de milieu poreux. *J. Mécanique*, 14 :73–108, 1975.

[Fir99] A. Firoozabadi. *Thermodynamics of hydrocarbon reservoirs*. McGraw-Hill Professional, 1999.

[For01] P. Forchheimer. Wasserbewegung durch boden. *Z. Ver. Deutsch. Ing*, 45 :1782–1788, 1901.

[GB06] C. Gilbert and I. Bourdeaux. Recherche et déchets nucléaires - une réflexion interdisciplinaire (ouvrage collectif). *Cahiers Risques Collectifs et Situations de Crise*, (5), février 2006.

[GMT96] G. Gagneux and M. Madaune-Tort. *Analyse mathematique de modeles non lineaires de l'ingenierie petroliere*. Springer-Verlag, 1996.

[GS08] C. Galusinski and M. Saad. A nonlinear degenerate system modeling water–gas in porous media. *Discrete and Continuous Dynamical Systems-B*, 9 :281–308, 2008.

[JS09] J. Jaffré and A. Sboui. Henry' Law and Gas Phase Disappearance. *Transport in Porous Media*, 2009.

[LTE76] S.H. Lai, J.M. Tiedje, and A.E. Erickson. In situ measurement of gas diffusion coefficient in soils. *Soil Science Society of America Journal*, 40(1) :3, 1976.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

[MDvD06] A. Mikelić, V. Devigne, and C. J. van Duijn. Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers. *SIAM J. Math. Anal.*, 38(4) :1262–1287, 2006.

[Mik09] A. Mikelic. An existence result for the equations describing a gas-liquid two-phase flow. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(4) :226 – 232, 2009.

[MoM] MoMaS. http ://www.gdrmomas.org.

[MQ61] R.J. Millington and J.P. Quirk. Permeability of porous solids. *Transactions of the Faraday Society*, 57 :1200–1207, 1961.

[MS71] R.J. Millington and R.C. Shearer. Diffusion in aggregated porous media. *Soil Science*, 111(6) :372, 1971.

[Rib04] I. Ribet. Dossier opérationnel verre 2004 - modèles opérationnels et calculs d'intégration. Rapport technique CEA/DTCD/2004-4, CEA, 2004.

[RM85] E.J. Reardon and P.M. Moddle. Gas diffusion coefficient measurements on uranium mill tailings : Implications to cover layer design. *Uranium (Amsterdam)*, 2(2) :111–131, 1985.

[Sch61] A.E. Scheidegger. General theory of dispersion in porous media. *J. Geophys. Res*, 66(10) :3273–3278, 1961.

[Sch01] M Schatzman. *Analyse numérique, une approche mathématique*. Dunod, 2001.

[SHSP92] J. Sanchez-Hubert and E. Sanchez-Palencia. *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation : application à la mécanique des milieux continus*. Masson, 1992.

[SP80] E. Sanchez-Palencia. *Nonhomogeneous media and vibration theory*, volume 127 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1980.

[Whi86] S. Whitaker. Flow in porous media I : A theoretical derivation of Darcy's law. *Transport in Porous Media*, 1(1) :3–25, 1986.

[WMK91] W.J. Weber, P.M. McGinley, and L.E. Katz. Sorption phenomena in subsurface systems : Concepts, models and effects on contaminant fate and transport. *Water Research*, 25(5) :499–528, 1991.

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

tel-00463607, version 1 - 12 Mar 2010

Résumé : Ce travail est consacré à l'analyse et au développement de concepts et d'outils mathématiques en vue de leur application à des problématiques propres aux sites de stockage géologique profond de déchets radioactifs. La première partie porte sur l'estimation en champ lointain de la concentration de radionucléides issus du relâchement des colis de confinement, lorsque les incertitudes sur le relâchement sont prises en compte. En s'appuyant sur les travaux de A. Bourgeat et A. Piatniski sur l'homogénéisation d'une équation de convection-diffusion avec second membre aléatoire, on développe des outils numériques permettant d'approcher le comportement probabiliste du champ de concentration dans une configuration du type site de stockage. Dans une seconde partie, on s'intéresse à la migration de gaz dans et autour d'un site de stockage. Après une revue sur la modélisation physique des écoulements diphasiques de type eau/hydrogène en milieu poreux, on propose une nouvelle formulation mathématique du problème qui décrit, dans un même jeu d'équations, les écoulements à une (liquide) et deux (liquide/gaz) phases. Une étude de l'existence de solutions de cette formulation est menée à l'aide de la théorie générale des équations différentielles quasilinéaires elliptiques-paraboliques introduite par H.W. Alt et S. Luckhaus. Une méthode de résolution numérique du problème est mise en œuvre pour la simulation de différents cas test, des plus simples au plus représentatif d'un site de stockage géologique. Enfin, l'homogénéisation périodique du modèle est effectuée et appliquée à la simulation de l'exercice Couplex-Gaz proposé par l'ANDRA.

Mots clés : milieu poreux, stockage géologique des déchets radioactifs, modélisation, aléatoire, écoulement diphasique, homogénéisation

Development of mathematical and numerical tools for assessment of underground disposal concept

Abstract : The purpose of this work is to analyze and develop mathematical concepts and tools in application to performance assessment of an underground nuclear waste disposal. The first part is concerned with estimating the far field concentration of radionuclides released by containers of waste when uncertainties on the release are taking in account. Using the work of A. Bourgeat and A. Piatniski about homogenization of a convection-diffusion equation with random source term, numerical tools are developed to approximate the random behavior of the concentration field in an underground disposal configuration. In a second part, we are interested in gas migration in and around an underground nuclear waste disposal. After a review on physical models of two-phase flow in porous media for water/hydrogen mixture, we propose a new mathematical formulation describing one- (liquid) and two- (liquid/gas) phase flow with a unique set of equation. Considering the general theory of quasilinear elliptic-parabolic differential equations introduced by H.W. Alt and S. Luckhaus, we study existence of solutions for this formulation. A numerical method to solve the problem is implemented to simulate several test cases. These test cases run from very simple situations to a representative configuration of an underground nuclear waste disposal. Finally, the periodic homogenization of the model is done and applied to simulate the Couplex-Gas exercise proposed by ANDRA.

Keywords : porous medium, underground nuclear waste management, modelling, randomness, two-phase flow, homogenization

Discipline : Mathématiques appliquées

Institut Camille Jordan
CNRS, UMR 5208

43 boulevard du 11 novembre 1918
69622 Villeurbanne cedex
France