WTNV131 - Diffusion d'air dissous dans l'eau (3D)

Résumé :

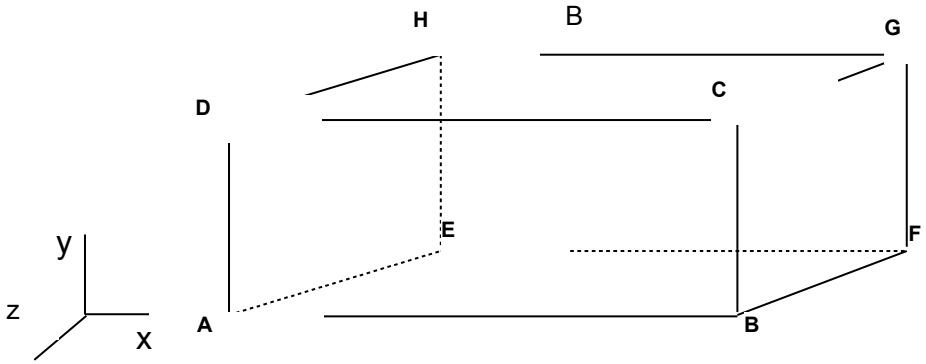
On considère ici un problème à température et saturation constantes. Par des conditions aux limites appropriées on impose une pression d'eau et une pression de vapeur constantes. Une pression de gaz est imposée sur un bord du domaine (flux nuls de l'autre coté). Seules les pressions d'air sec et d'air dissous reliées par la loi de Henry évoluent. Ce problème se ramène à une équation pour la pression d'air sec de type « équation de la chaleur ». La solution de référence sera alors un calcul thermique ASTER. Ce cas test est l'extension $3D$ du cas test WTNP103.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Problème de référence

1.1 Géométrie

On considère un barreau de longueur $1\mathrm{m}$ et de section $0.1\mathrm{m}\times 0.1\mathrm{m}$.



Coordonnées des points (m) :

	X	Y	Z		X	Y	Z
A	0	0	0	C	1	0,1	0
B	1	0	0	D	0	0,1	0
E	0	0	-0,1	G	1	0,1	-0,1
F	1	0	-0,1	H	0	0,1	-0,1

1.2 Propriétés du matériau

On ne donne ici que les propriétés dont la solution dépend. Le fichier de commandes contient d'autres données de matériau (modules d'élasticité, conductivité thermique …) qui ne jouent aucun rôle dans la solution du problème traité.

Eau liquide	Masse volumique ($kg.m^{-3}$)	10^3
	Chaleur massique à pression constante ($J.K^{-1}$)	0.
	Viscosité dynamique de l'eau liquide ($Pa.s$)	0.001
	coefficient de dilatation thermique du liquide (K^{-1})	0.
	Perméabilité relative à l'eau	$kr_w(S)=0.5$
Vapeur	Chaleur massique ($J.K^{-1}$)	0.
	Masse molaire($kg.mol^{-1}$)	0,01
Gaz	Chaleur massique ($J.K^{-1}$)	0.
	Masse molaire($kg.mol^{-1}$)	0,01
	Perméabilité relative au gaz	$kr_{gz}(S)=0.5$
	Viscosité du gaz ($kg.m^{-1.s^{-1}}$)	0.001
Air dissous	Chaleur massique ($J.K^{-1}$)	0.
	Constante de Henry ($Pa.m^{3.}mol^{-1}$)	50000
Etat initial	Porosité	1

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

	Température (K)	300
	Pression de gaz (Pa)	1.01E5
	Pression de vapeur (Pa)	1000
	Pression capillaire (Pa)	1.E6
	Saturation initiale en liquide	0,4
Constantes	Constante des gaz parfaits	8,32
Coefficients homogénéisés	Masse volumique homogénéisée ($kg.m^{-3}$)	2200
	Isotherme de sorption	$S(P_c)=0.4$
	Coefficient de Biot	0
	Fick Vapeur ($m^{2.}s^{-1}$)	$FV=0$
	Fick air dissous ($m^{2.}s^{-1}$)	$FA=6\ .E-10$
	Perméabilité intrinsèque (m^2)	$Kint=1.\mathrm{E}-19$

1.3 Conditions aux limites et chargements

Sur l'ensemble du domaine, on veut :

$$p_w = cte = p_w^0$$
$$\frac{1}{K_w} = 0 \Rightarrow \rho_w = cte = \rho_w^0$$
$$p_{vp} = cte = p_{vp}^0$$
$$F_{vp} = 0$$
$$S(p_c) = cte = S_0$$
$$T = cte = T^0$$
$$\phi = 1$$
$$M_{as}^{ol} = M_{vp}^{ol} = M_{ad}^{ol}$$

Sur tous les bords : Flux hydrauliques et thermiques nuls.

On va maintenant linéariser p_{vp} en fonction de p_w.

Ecriture de p_{vp} fonction linéaire de p_w :

La section 4.2.3 du document de référence *Aster* [R7.01.11] nous donne la relation : $\frac{dp_{vp}}{p_{vp}} = \frac{M_{vp}^{ol}}{RT}\frac{dp_w}{\rho_w}$.

Si on linéarise cette expression on obtient : $p_{vp} = \frac{p_{vp}^0}{RT}\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^0} p_w + \left[p_{vp}^0 - \frac{p_{vp}^0}{RT}\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^0} p_w^0 \right]$

que l'on peut écrire sous la forme :

$$p_{vp} = Ap_w + B \qquad \text{éq 1.3-1}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

avec $A = \frac{p_{vp}^0}{RT}\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^0}$ et $B = p_{vp}^0 - \frac{p_{vp}^0}{RT}\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^0} p_w^0$

Sur le bord gauche du barreau ($AEHD$) on impose $\begin{cases} p_{gz} = 115000 & Pa \\ pc = 10^6 & Pa \end{cases}$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Solution de référence

2.1 Méthode de calcul

Calcul de la conservation de la masse d'air

La conservation de la masse de gaz s'écrit :

$$\frac{dm_{air}}{dt} + div(\mathbf{M}_{as} + \mathbf{M}_{ad}) = 0 \qquad \text{éq 2.1.1-1}$$

On écrit que la masse totale d'eau et la masse totale d'air sont conservées (car il n'y a pas de flux d'eau ni de gaz au bord) et on obtient :

$$m_{air} = m_{as} + m_{ad} = S_0(\rho_{ad} - \rho_{ad}^0) + (1 - S_0)(\rho_{as} - \rho_{as}^0)$$

donc

$$d(m_{as} + m_{ad}) = S_0 d\rho_{ad} + (1 - S_0) d\rho_{as} \qquad \text{éq 2.1.1-2}$$

$$d\rho_{as} = \frac{M_{as}^{ol}}{RT} dP_{as} \text{ et } d\rho_{ad} = \frac{M_{ad}^{ol}}{K_H} dP_{as}$$

$$\frac{dm_{air}}{dt} = \left(S_0 \frac{M_{as}^{ol}}{K_H} + (1 - S_0) \frac{M_{as}^{ol}}{RT} \right) \frac{dP_{as}}{dt}$$

Calcul des vitesses :

$$\frac{\mathbf{M_{as}}}{\rho_{as}} = \lambda_{gz}(-\nabla P_{as}) \qquad \text{éq 2.1.1-3}$$

puisque $F_{vp} = 0$ et $\nabla P_{vp} = 0$ et $\mathbf{M_{ad}} = \rho_{ad}\lambda_{lq}(-\nabla P_{lq}) - F_{ad}\nabla C_{ad}$ avec $C_{ad} = \rho_{ad}$.

Comme $\nabla P_{lq} = \nabla P_w + \nabla P_{ad} = \nabla P_{ad} = \frac{RT}{K_H}\nabla P_{as}$

$$\mathbf{M_{ad}} = \rho_{ad}\lambda_{lq}\frac{RT}{K_H}(-\nabla P_{as}) - \frac{M_{ad}^{ol}}{K_H} F_{ad}\nabla P_{as}$$

[éq 2.1.1-1] peut alors se simplifier sous la forme suivante :

$$C\frac{dP_{as}}{dt} = L\,div(\nabla P_{as})$$

avec

$$C = S_0 \frac{M_{as}^{ol}}{K_H} + (1 - S_0)\frac{M_{as}^{ol}}{RT}$$

$$L = \rho_{as}^0 \lambda_{gz} + \frac{RT}{K_H}\rho_{ad}^0 \lambda_{lq} + \frac{M_{as}^{ol}}{K_H} F_{ad}$$

Equation de la chaleur classique que l'on traite par un calcul thermique.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.2 Résultats de référence

Avec les valeurs numériques précédentes, on trouve :

$$P_{as} = 10^5 \Rightarrow P_{ad}^0 = \frac{RT}{K_H} P_{as}^0 = 4992$$

$$\rho_{as}^0 = \frac{M_{as}^{ol}}{RT} P_{as}^0 = 0.4 \text{ et } \rho_{ad}^0 = \frac{M_{ad}^{ol}}{RT} P_{ad}^0 = 0.02$$

$$\rho_{vp}^0 = \rho_{vp} = 4.10^{-3}$$

Les constantes de l'équation de la chaleur sont alors :

$$C = 2{,}48.10^{-6}$$

$$L = 1{,}4.10^{-16}$$

2.3 Incertitudes sur la solution

Les incertitudes sont assez grandes étant donné que la solution quasi-analytique (fruit d'un calcul thermique) est une solution approchée du fait de la linéarisation des équations.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3 Modélisation A

3.1 Caractéristiques de la modélisation

Modélisation en 3D : 3D_HH2MD.

3.2 Caractéristiques de la modélisation

203 éléments TETRA10.

3.3 Grandeurs testées et résultats

On rappelle que la température issue du calcul thermique correspond à la pression d'air sec de notre calcul thermo-hydro-mécanique. La pression de vapeur étant constante on a :

$$P_{gz} = PRE2^{DDL} + PRE2^{init} = P_{vp}^{0} + P_{as}$$

$X(m)$	**Temps** (s)	$PRE2$	**Tolérance (** $\%$ **)**
0,2	3E9	1.120E4	1%
0,2	5E9	1.223E3	1%
0,5	3E9	6570	1%
0,5	5E9	8685	1%

Par ailleurs, deux tests de non-régression sont effectués sur la contrainte de Von Mises (VMIS) et de Tresca (TRESCA).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4 Modélisation B

4.1 Caractéristiques de la modélisation B

Même chose que la modélisation A mais en modélisation sélective : 3D_HH2MS.

4.2 Grandeurs testées et résultats

On rappelle que la température issue du calcul thermique correspond à la pression d'air sec de notre calcul thermo-hydro-mécanique. La pression de vapeur étant constante on a :

$$P_{gz} = PRE2^{DDL} + PRE2^{init} = P_{vp}^{0} + P_{as}$$

$X(m)$	**Temps** (s)	$PRE2$	**Tolérance (** $\%$ **)**
0,2	3E9	1.120E4	1%
0,2	5E9	1.223E3	1%
0,5	3E9	6570	1%
0,5	5E9	8685	1%

Par ailleurs, deux tests de non-régression sont effectués sur la contrainte de Von Mises (VMIS) et de Tresca (TRESCA).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

5 Modélisation C

5.1 Caractéristiques de la modélisation C

Même chose que la modélisation A mais en modélisation sélective : 3D_HH2M_SI.

5.2 Grandeurs testées et résultats

On rappelle que la température issue du calcul thermique correspond à la pression d'air sec de notre calcul thermo-hydro-mécanique. La pression de vapeur étant constante on a :

$$P_{gz} = PRE2^{DDL} + PRE2^{init} = P_{vp}^{0} + P_{as}$$

$X(m)$	**Temps** (s)	$PRE2$	**Tolérance (** $\%$ **)**
0,2	3E9	1.120E4	1%
0,2	5E9	1.223E3	1%
0,5	3E9	6570	1%
0,5	5E9	8685	1%

Par ailleurs, deux tests de non-régression sont effectués sur la contrainte de Von Mises (VMIS) et de Tresca (TRESCA).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

6 Synthèse des résultats

Les résultats sont en très bon accord avec la solution semi-analytique.

Pour les modélisations A et C, le critère de convergence est fixé à `RESI_GLOB_RELA = 1E-14` afin de minimiser l'erreur sur la solution (tests de non-régression) liée à la formulation mixte du problème.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)