

Résolution par la méthode de Monte Carlo de modèles multi-échelles non linéaires pour les photo-procédés solaires

Victor Gattepaille, Jérémi Dauchet, Fabrice Gros, Matthieu Roudet,
Caroline Supplis, Jean-François Cornet

Université Clermont Auvergne, CNRS, Sigma Clermont, Institut Pascal, F-63000
Clermont-Ferrand Cedex

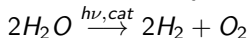
22-23/11/2018



Industrialisation de procédés photo-catalytiques

Deux enjeux importants:

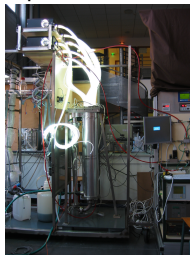
- ▶ Trouver un catalyseur efficace pour l'électrolyse de l'eau:



- ▶ Développer des procédés à grande échelle :

à une production annuelle

De la captation du soleil



Possibilités :

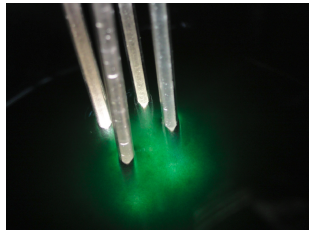
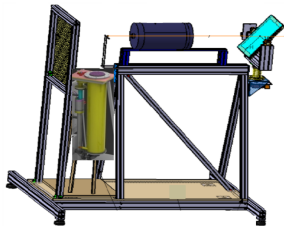
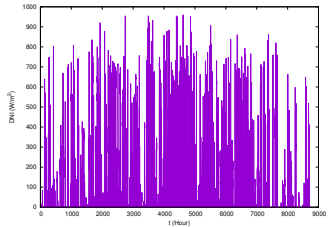
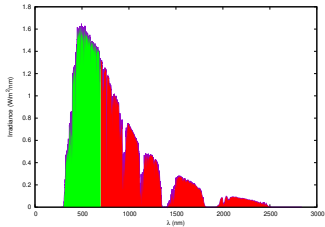
x 30 sur l'efficacité

x 100 sur la productivité



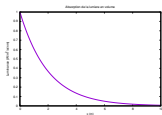
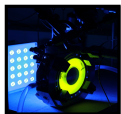
Développement de modèles de connaissances

Le champ radiatif contrôle les performances du procédé : il est nécessaire de le modéliser pour approcher le maximum théorique.



Eq. de Transfert Rad.

Champs radiatif

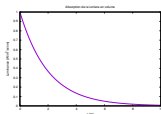
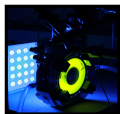


Eq. de Transfert Rad.

← Eq. de Maxwell

Champs radiatif

Propriétés
d'absorption et
de diffusion



Eq. de Transfert Rad.

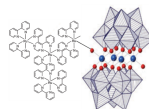
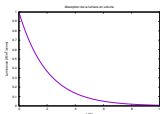
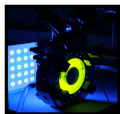
← Eq. de Maxwell

← DFT/Exp

Champs radiatif

Propriétés
d'absorption et
de diffusion

Indice de réfraction



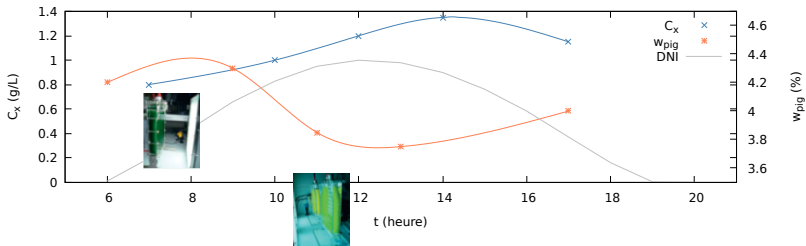
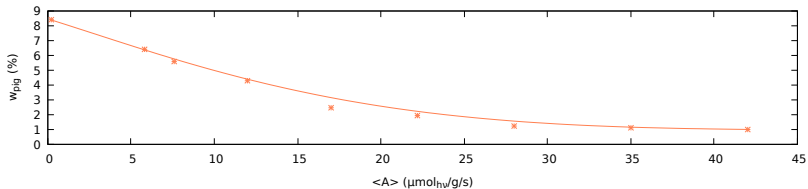
m

mm

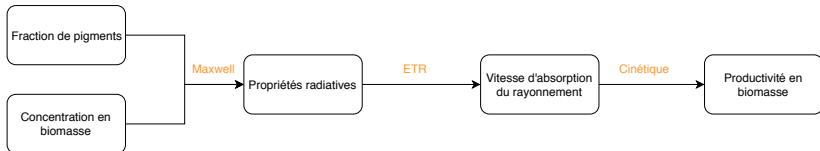
μm

nm



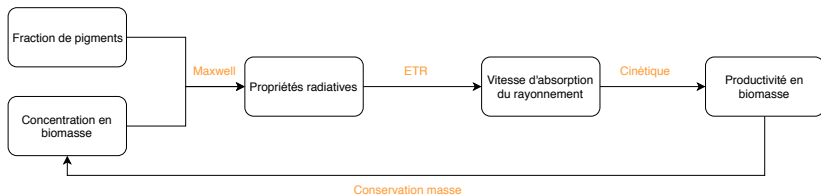


Résultats expérimentaux : Thèse Arnaud ARTU - GEPEA (*chlorella vulgaris*)



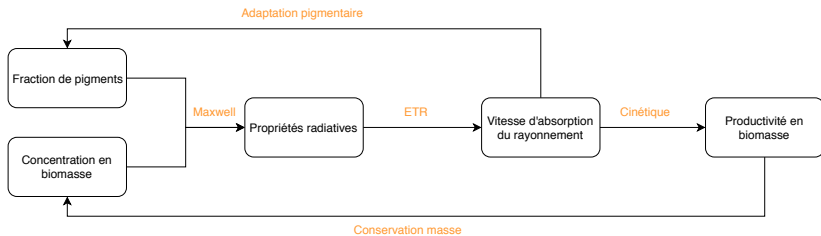
Deux enjeux :

- ▶ Temps de calcul
- ▶ Propagation d'informations (erreur numérique, sensibilités...)



Deux enjeux :

- ▶ Temps de calcul
- ▶ Propagation d'informations (erreur numérique, sensibilités...)



Deux enjeux :

- ▶ Temps de calcul
- ▶ Propagation d'informations (erreur numérique, sensibilités...)

Couplage cinétique

$$\langle \bar{r}_x \rangle = \int_{\Delta t} dt \int_{Volume} \frac{1}{V} f_{non\ lin}(\mathcal{A}_x(t))$$

Vitesse d'absorption locale du réacteur

$$\mathcal{A}_x(t) = \int_{\Delta\nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\Gamma} d\gamma p_{\Gamma}(\gamma, t) \omega(\gamma, t)$$

Chemins optiques

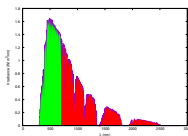
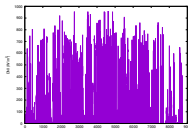
$$p_{\Gamma}(\gamma) = f_{non\ lin}(C_x, W_{pig})$$

Concentration en biomasse

$$C_x(t) = C_{x0} \exp\left(-\int_0^t dt' \frac{1}{\tau(t')}\right) + \int_0^t dt' \exp\left(\int_{t'}^t dt'' \frac{1}{\tau(t'')}\right) \langle r_x \rangle(t')$$

Dynamique pigmentaire

$$k_{S,n,\nu}(t) = f_{\gamma}(\mathcal{A}_x(t))$$

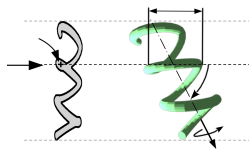
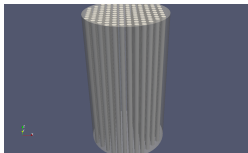
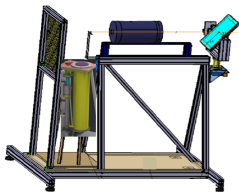


Objectif : traverser les échelles en une procédure MC

- ▶ Grande dimension d'intégration :

$$\langle \bar{r}_x \rangle = \int_{\Delta t} dt \int_{Volume} \frac{1}{V} f_{non\ lin} \left(\int_{\Delta \nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\Gamma} d\gamma p_\Gamma(\gamma, t) \dots \right)$$

- ▶ Géométrie complexe à plusieurs échelles

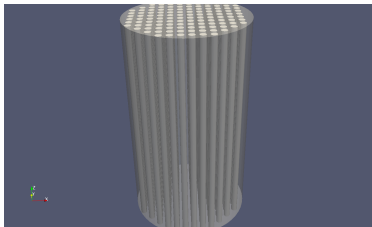


Un verrou : les non linéarités

Collaborations :



RAPSODEE



- ▶ Couplage cinétique linéaire
- ▶ Base de donnée météo
Meteornom
- ▶ Spectre solaire AM1.5
- ▶ Purement absorbant
- ▶ Concentration en biomasse
et fraction en pigments
constants
- ▶ Approximation de Schiff

Productivité en biomasse

$$\langle r_x \rangle = \int_{\Delta t} dt p_{\Delta t}(t) \int_{\Delta \nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\delta V} \frac{d\vec{x}}{S} \int_0^\infty dl k_{a,\nu} e^{-k_{a,\nu} l} \omega(t)$$

$$k_{a,\nu} = C_x \int_{D(\vec{g})} p_{\vec{g}}(\vec{g}) \int_{P(\vec{g})} d\vec{r} (1 - e^{-\sum_{n=1}^{N_{abs}} k_{s,n,\nu} l(\vec{r})})$$

Productivité en biomasse

$$\langle r_x \rangle = \int_{\Delta t} dt p_{\Delta t}(t) \int_{\Delta \nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\delta V} \frac{d\vec{x}}{S} \int_0^\infty dl k_{a,\nu} e^{-k_{a,\nu} l} \omega(t)$$

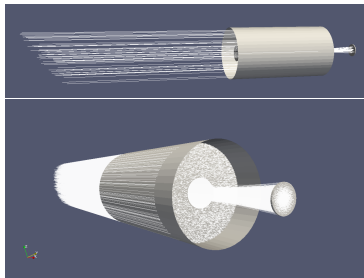
$$k_{a,\nu} = C_x \int_{D(\vec{g})} p_g(\vec{g}) \int_{P(\vec{g})} d\vec{r} (1 - e^{-\sum_{n=1}^{N_{abs}} k_{s,n,\nu} l(\vec{r})})$$



Productivité en biomasse

$$\langle r_x \rangle = \int_{\Delta t} dt p_{\Delta t}(t) \int_{\Delta \nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\delta V} \frac{d\vec{x}}{S} \int_0^\infty dl k_{a,\nu} e^{-k_{a,\nu} l} \omega(t)$$

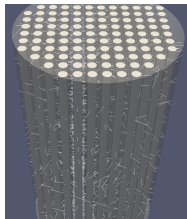
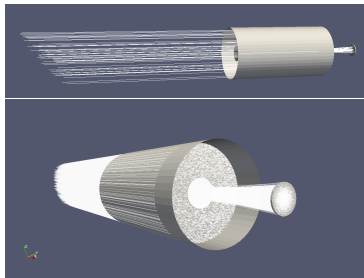
$$k_{a,\nu} = C_x \int_{D(\vec{g})} p_g(\vec{g}) \int_{P(\vec{g})} d\vec{r} (1 - e^{-\sum_{n=1}^{N_{abs}} k_{s,n,\nu} l(\vec{r})})$$



Productivité en biomasse

$$\langle r_x \rangle = \int_{\Delta t} dt p_{\Delta t}(t) \int_{\Delta v} dv p_v(v) \int_{\delta V} \frac{d\vec{x}}{S} \int_0^\infty dl k_{a,v} e^{-k_{a,v} l} \omega(t)$$

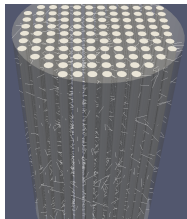
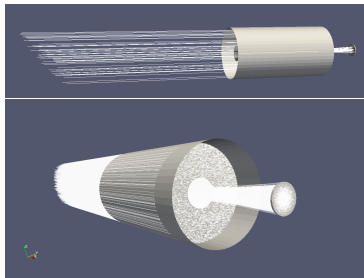
$$k_{a,v} = C_x \int_{D\vec{g}} p_g(\vec{g}) \int_{P(\vec{g})} d\vec{r} (1 - e^{-\sum_{n=1}^{N_{abs}} k_{s,n,v} l(\vec{r})})$$



Productivité en biomasse

$$\langle r_x \rangle = \int_{\Delta t} dt p_{\Delta t}(t) \int_{\Delta \nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\delta V} \frac{d\vec{x}}{S} \int_0^\infty dl k_{a,\nu} e^{-k_{a,\nu} l} \omega(t)$$

$$k_{a,\nu} = C_x \int_{D\vec{g}} p_g(\vec{g}) \int_{P(\vec{g})} d\vec{r} (1 - e^{-\sum_{n=1}^{N_{abs}} k_{s,n,\nu} l(\vec{r})})$$

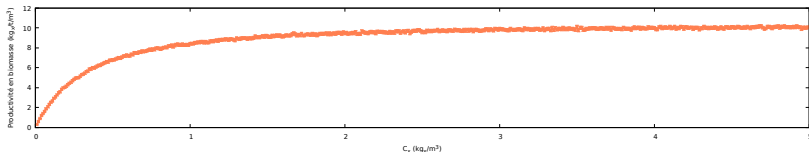


Productivité en biomasse

$$\langle r_x \rangle = \int_{\Delta t} dt p_{\Delta t}(t) \int_{\Delta \nu} d\nu p_\nu(\nu) \int_{\delta V} \frac{d\vec{x}}{S} \int_0^\infty dl k_{a,\nu} e^{-k_{a,\nu} l} \omega(t)$$

$$k_{a,\nu} = C_x \int_{D(\vec{g})} p_g(\vec{g}) \int_{P(\vec{r})} d\vec{r} (1 - e^{-\sum_{n=1}^{N_{abs}} k_{s,n,\nu} l(\vec{r})})$$

| | Calcul séquentiel | Calcul direct (MMC) |
|------------------|---|---|
| Temps de calcul | t | $\frac{t}{100}$ |
| Erreur numérique | Question à part entière : $t \nearrow$ | Naturellement accessible |
| Sensibilités | Question à part entière : $t \nearrow$ | Accessible ? <i>J-M Tregan, GDR Accort 2017</i> |



À court terme

- ▶ Travail sur les sensibilités
- ▶ Raffinement/diversifications des modèles à chaque échelle :
 - ▷ Dynamiques temporelles (C_x , ω_{pig})
 - ▷ Diffusion
 - ▷ Catalyseur synthétique (autres formulations des équations de Maxwell - *Thèse Julien Charon*)
- ▶ Développement du DiCoFluV-Hy

À long terme

Extension de ce travail aux cellules photo-électrochimiques

Merci !

