

Développement d'un schéma de volumes finis hybride dans Aster pour les écoulements diphasiques darcéens

O. Angélini (LaMSID-EDF R&D)

R. Eymard (Univ Marne la Vallée)

E. Chénier (Univ Marne la Vallée)

S. Granet (LaMSID-EDF R&D)

Plan

- Les équations des écoulements diphasiques darcéens
- Choix des variables principales et de la formulation continue
- Les EF THM dans Code_Aster
- Les VF dans Code_Aster :
 - ✓ Architecture logicielle
 - ✓ Sushi monophasique
 - ✓ Sushi diphasique
- Conclusions

Les écoulements darcéens diphasiques

➤ Conservation de la masse : 2 constituants (w,a) dans 2 phases (l,g)

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\rho_l^w S_l + \rho_g^w S_g)) + \text{Div}(\mathbf{F}_l^w + \mathbf{F}_g^w) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\rho_l^a S_l + \rho_g^a S_g)) + \text{Div}(\mathbf{F}_l^a + \mathbf{F}_g^a) = 0 \end{cases}$$

➤ Lois de diffusion hydraulique:

• Darcy + diffusion
par phases dans chaque phase

équilibre
(dissolution /vaporisation)

$$\begin{cases} \mathbf{F}_l^w = -k_l^w \mathbf{k} \nabla p_l - D_l C_l^w \nabla(C_l^w) & ; \quad \mathbf{F}_g^w = -k_g \mathbf{k} \nabla p_g - D_g C_g^w \nabla(C_g^w) \\ \mathbf{F}_l^a = -k_l^a \mathbf{k} \nabla p_l - D_l C_l^a \nabla(C_l^a) & ; \quad \mathbf{F}_g^a = -k_g^a \mathbf{k} \nabla p_g - D_g C_g^a \nabla(C_g^a) \end{cases}$$

$$p_g^w = \hat{p}_{vp}^*(T) \exp\left(\frac{M_w}{RT} \frac{p_l^w - p_l^*}{\rho_l^w}\right)$$

$$p_g^a = \rho_l^a / M_a H$$

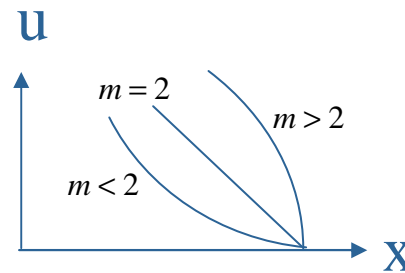
• Comportement capillaire

$$P_c = f(S_l) = P_g - P_l$$

Caractéristiques des équations d'écoulement

- Équations évolutives non linéaires
- Apparition de fronts

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



- Quantités physiques bornées :
 - ✓ Saturations et concentrations comprises entre 0 et 1
 - ✓ Masses volumiques positives

➤ Caractéristiques des milieux

- ✓ Forts contrastes :
 - Contrastes de perméabilités initiales (BO, jeux ...)
 - Saturation initiale

Choix des variables principales

➤ La pression globale

✓ En incompressible immiscible : mise en évidence termes de transport

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_l^w + \mathbf{F}_g^a \quad \begin{cases} \text{Div} \mathbf{F} = 0 \\ \mathbf{F} = -\psi(S) d(S) \nabla P \end{cases} \quad \begin{cases} \varphi \rho_l^w \frac{\partial S}{\partial t} - \text{Div} \mathbf{F}_l^w = 0 \\ \mathbf{F}_l^w = -\psi(S) d(S) \nabla \alpha(S) + b(S) \mathbf{F} \end{cases}$$

➤ variables Pc/Pg : la conservation de la masse d'air dégénère en S=1

$$\varphi \frac{\partial (\rho_g^a (1-S))}{\partial t} - \nabla (\rho_g^a k_g(S) \nabla p_g^a) = 0$$

➤ Formulation Pg, Sl

$$\varphi (1-S) \frac{\partial p_l^w}{\partial t} + \varphi (g(S) - p_l^w) \frac{\partial S}{\partial t} - \nabla [p_g^a h(S) \nabla S] - \nabla [p_g^a k_g^a(S) \nabla p_l^w] = 0$$

✓ En S=1 et immiscible donne dS/dt=0 : bon en immiscible

✓ Mais nécessite changement de variable en miscible dans zone =1

Choix des variables principales : Pl, Pg

➤ Benchmark Couplex gaz : cas avec dissolution plus facile

▪ Conservation de la masse d'air

$$\varphi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g^a S_g + \rho_l^a S_l) - \text{Div} \left(\rho_g^a \frac{k_s^{rel}}{\mu_g} K_{int} \nabla P_g + \rho_l^a \frac{k_l^{rel}}{\mu_l} K_{int} \nabla P_l + \rho_l S_l D_l \nabla C_l^a \right)$$

▪ Dissolution

$$(1 - S_l) \geq 0 \quad H(P_l + P_c) - \rho_l^a \geq 0 \quad (1 - S_l) [H(P_l + P_c) - \rho_l^a] = 0$$

▪ En variables Pl, Pg :

✓ Zone insaturée : $S_l < 1 \quad H(P_l + P_c) = H.P_g = \rho_l^a$

✓ Zone saturée : $S_l = 1 \quad H.P_l \geq \rho_l^a$

• Changement de variable : $\hat{P}_g = \frac{\rho_l^a}{H} \Rightarrow \hat{P}_g - P_l \leq 0$

• Prolongement courbe capillaire : $P_c(S_l) \leq 0 \Leftrightarrow S_l(P_c < 0) = 1$

Discrétisation spatiale EF de la THM dans Aster

➤ Discrétisation spatiale :

- **Déplacements P2 ou Q2**
- **Pressions et température P1 ou Q1**
- **Résultat théorique de convergence (S. Meunier, A.Ern)**

$$\|u_h - u\|_1 \leq Ch^2$$

$$\|p_h - p\|_0 \leq Ch^2$$

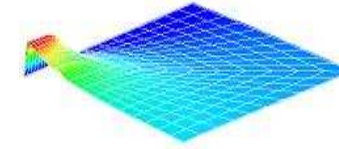
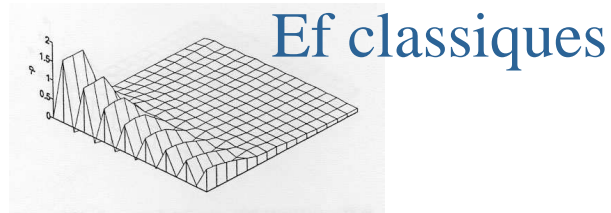
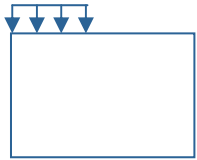
$$\sqrt{\int_{\Omega} \|p_h - p\|_1^2} \leq Ch$$

➤ Intégration numérique sélective :

- **Tous les termes correspondant à une dérivée en temps sont intégrés aux sommets**
- **Tous les autres (en fait les termes de diffusion) sont intégrés avec des points de gauss « classiques »**

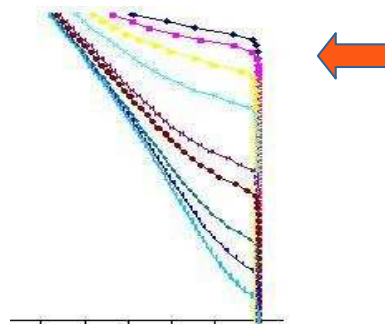
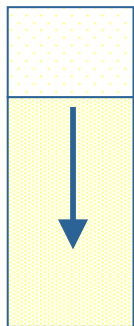
Discrétisation spatiale EF de la THM dans Aster

➤ OK sur test de consolidation



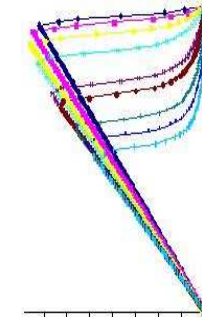
Ef Q2/Q1+intégration sélective

➤ OK sur test de désaturation (Liakopoulos) →



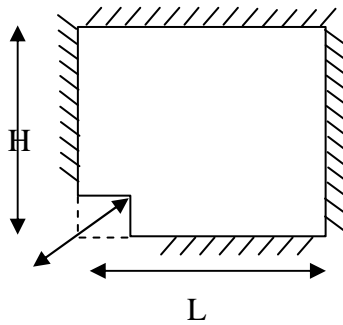
Saturation

Pression d'air

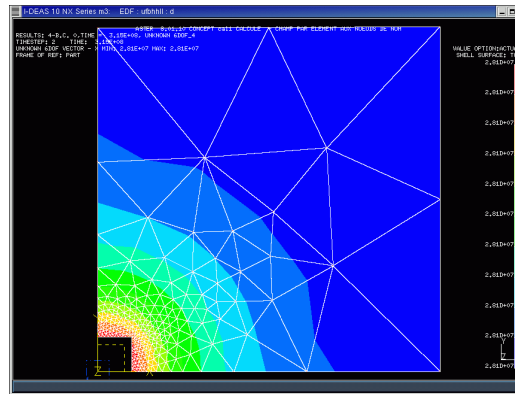


Discrétisation spatiale EF de la THM dans Aster

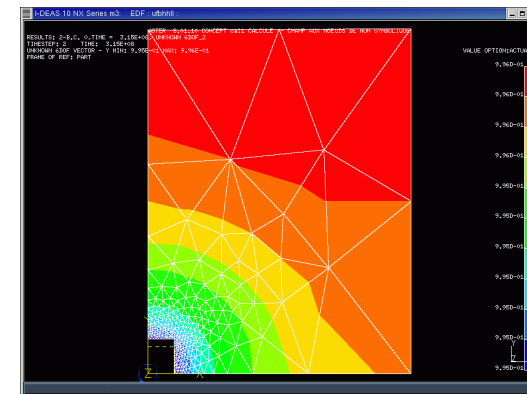
➤ Ne marche pas sur maillages déformés



Injection gaz



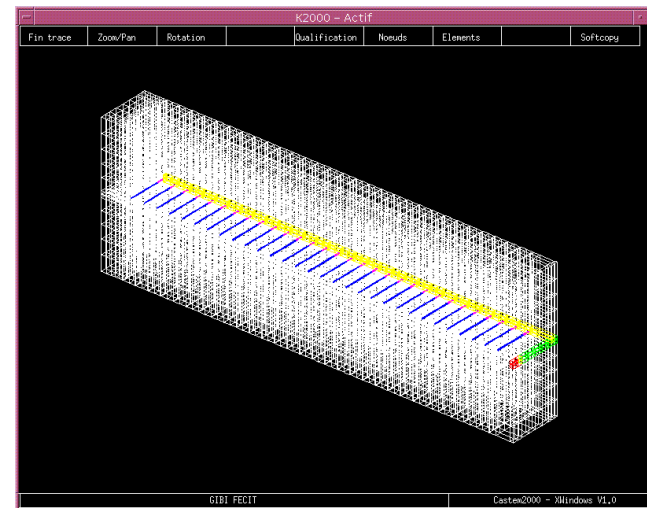
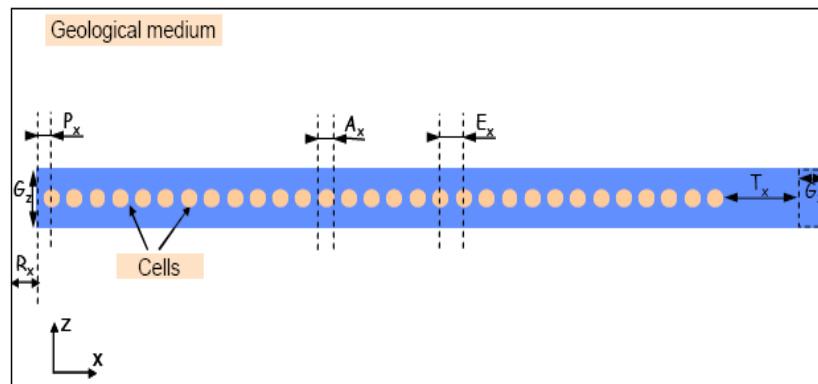
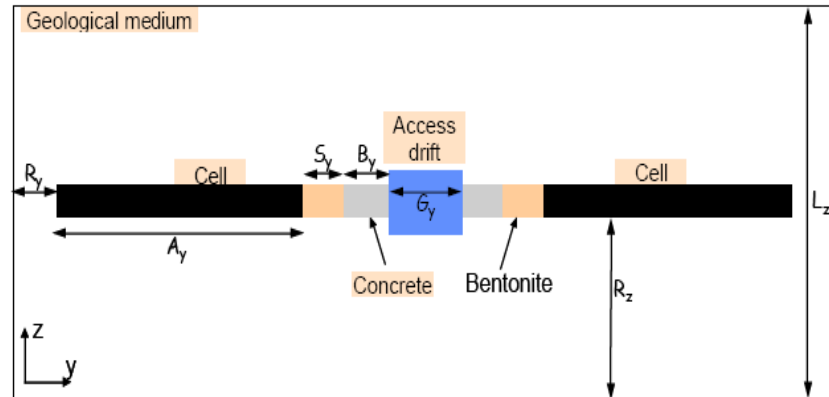
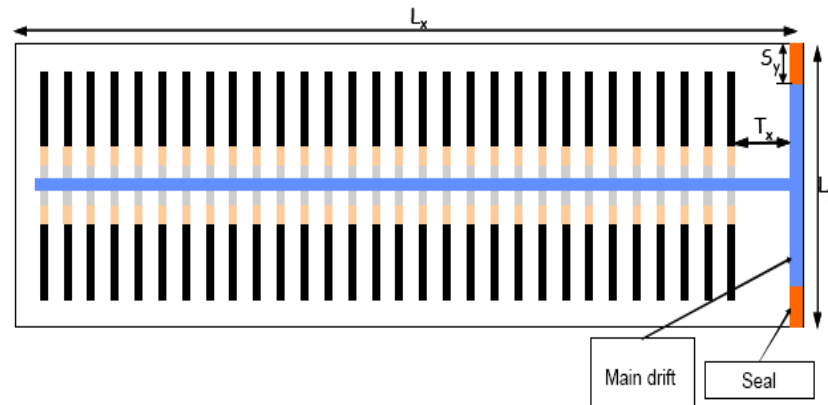
Pg 10 ans $H/L=1$



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

➤ Aucune convergence pour $H/L > 4/3$

Calcul 3D d'injection de gaz en EF



Length $L_y = 100\text{m}$ Width : 30m

115 000 éléments – 160 000 nœuds – 287 000 équations

CPU time : 100 heures pour une simulation de 500 000 ans

Les VF dans Aster

➤ Objectifs :

- ✓ Permettre de bénéficier des avancées de la communauté des VF très active dans le domaine des écoulements

➤ Une approche numérique différente

- ✓ EF est une discrétisation interne . utilise une formulation variationnelle, s'appuie sur des fonctions de forme
- ✓ VF plus prêt des approximations externes : on calcule des flux discrets et/ou des gradients discrets

➤ Une vision différente des degrés de liberté :

- ✓ En EF, les ddl sont portés par des nœuds. Des ddl sont connectés si ils appartiennent à un même élément
- ✓ En VF, certains ddl peuvent être connectés s'ils appartiennent à des mailles voisines

Les évolutions logicielles Aster pour accueillir les VF

- SD de voisinage au niveau du maillage :
- Pour chaque maille, on a les mailles voisines et leur type de voisinage
 - ✓ Une maille 3D peut avoir des voisins :
 - 3D par face, arête ou sommet
 - 2D par face, arête ou sommet
 - 1D par arête ou sommet
 - 0D par sommet
- Chaque type de volume fini déclare quel type de voisin il utilise
- Les résultats élémentaires de type matrice sont des matrices rectangulaires :

| | | | | | | | | | | Voisin 1 | | | | | |
|----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|----------|------|------|------|------|------|
| | | N1 | | N2 | | N3 | | N4 | | N1 | | N2 | | N3 | |
| N1 | CMP1 | CMP1 | CMP2 | CMP1 | CMP2 | CMP1 | CMP2 | CMP1 | CMP2 | CMP1 | CMP2 | CMP1 | CMP2 | CMP1 | CMP2 |
| | CMP2 | | | | | | | | | | | | | | |
| N2 | CMP1 | | | | | | | | | | | | | | |
| | CMP2 | | | | | | | | | | | | | | |
| N3 | CMP1 | | | | | | | | | | | | | | |
| | CMP2 | | | | | | | | | | | | | | |
| N4 | CMP1 | | | | | | | | | | | | | | |
| | CMP2 | | | | | | | | | | | | | | |

Le schéma SUSHI (Scheme Using Stabilization and Hybrid Interfaces)

➤ Cas d'une équation parabolique scalaire

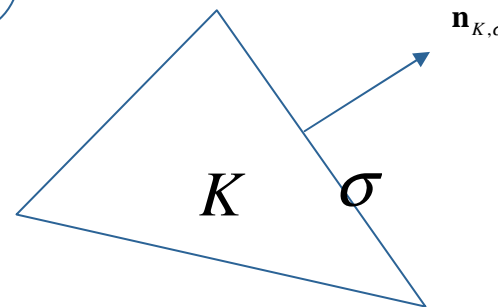
✓ Équation continue

$$\frac{\partial(\rho(p))}{\partial t} - \text{Div}(\mathbf{k}\nabla p) = 0$$

✓ Équation discrète en espace et en temps :

$$\frac{A_K}{\Delta t} (\rho(p_K) - \rho(p_K^-)) + \sum_{\sigma \in E_k} F_{K,\sigma}^D = 0$$

$$F_{K,\sigma}^D \approx \int_{\sigma} \mathbf{k}\nabla p \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$$



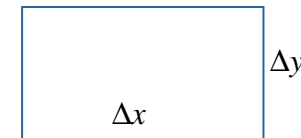
Flux gradients et formes bilinéaires discrets

- La méthode Sushi s'appuie sur des inconnues de mailles et des inconnues sur le bords des mailles
- A la forme bilinéaire de diffusion du problème continue correspond une forme bilinéaire discrète qui se calcule à partir de flux discrets lesquels correspondent à des gradients discrets :

$$\int_K \nabla p \cdot \mathbf{k} \nabla p^* \approx \int_K \nabla_D p \cdot \mathbf{k} \nabla_D p^* = \sum_{\sigma \in E_k} \int_K F_{K,\sigma}^D(p_K, p_\sigma) (p_\sigma^* - p_K^*)$$

- Une expression naturelle du gradient :

$$\nabla_K p = \frac{1}{A_K} \sum_{\sigma \in E_k} A_\sigma (p_\sigma - p_K) \mathbf{n}_{K,\sigma}$$



$$\nabla_x p = \frac{\Delta y}{\Delta x \Delta y} (p_x^2 - p_K - p_x^1 + p_K)$$

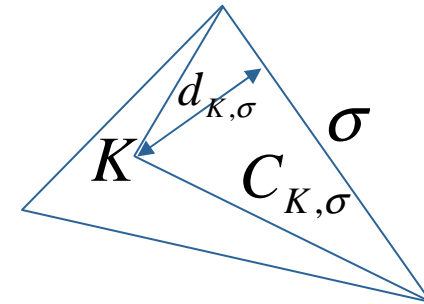
- ✓ Mais finalement indépendante de p_K

Modification des gradients

➤ Ajouter un terme qui couple les inconnues p_K p_σ en préservant la cohérence de l'approximation (exacte pour les fonctions affines)

$$\forall \mathbf{x} \in C_{K,\sigma}, \quad \nabla_D p(\mathbf{x}) = \nabla_K p + \beta_K R_{K,\sigma} \mathbf{n}_{K,\sigma}$$

$$R_{K,\sigma} = \frac{p_\sigma - p_K - \nabla_K p \cdot (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_K)}{d_{K,\sigma}}$$



➤ En utilisant la définition de la forme bilinéaire

$$\int_K \nabla_D p \cdot \mathbf{k} \nabla_D p^* = \sum_{\sigma \in E_K} \int_K F_{K,\sigma}^D(p_K, p_{\sigma'}) \cdot (p_{\sigma'}^* - p_K^*) \quad \text{on trouve :}$$

$$\int_K \nabla_D p \cdot \mathbf{k} \nabla_D p^* = A_K \nabla_K p \cdot \mathbf{k}_K \nabla_K p^* + \sum_{\sigma \in E_K} \alpha_{K,\sigma} A_\sigma d_{K,\sigma} R_{K,\sigma}(p) R_{K,\sigma}(p^*)$$

$$\alpha_{K,\sigma} = \frac{\beta_K^2}{d} \mathbf{n}_{K,\sigma} \cdot \mathbf{k}_K \nabla_K \mathbf{n}_{K,\sigma}$$

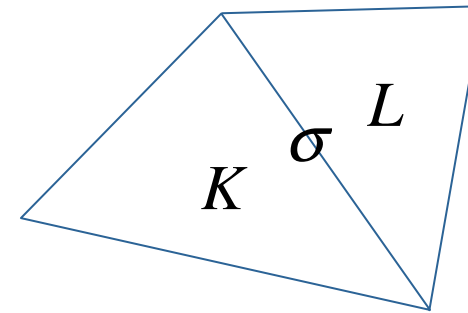
$$F_{K,\sigma}^D = \sum_{\sigma' \in E_K} C_K^{\sigma,\sigma'} (p_{\sigma'} - p_K)$$

Équations relatives aux inconnues de face

➤ Continuité des flux :

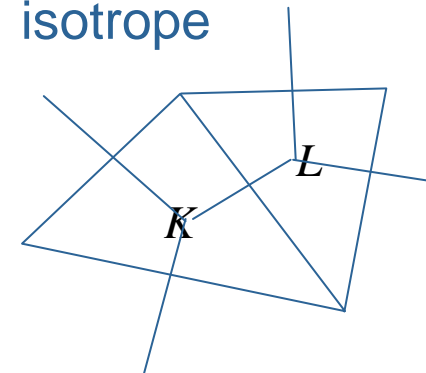
$$F_{K,\sigma}^D + F_{L,\sigma}^D = 0$$

$$\sum_{\sigma' \in E_K} C_K^{\sigma,\sigma'} (p_{\sigma'} - p_K) + \sum_{\sigma'' \in E_L} C_L^{\sigma,\sigma''} (p_{\sigma''} - p_L) = 0$$



➤ Cas d'un maillage super-admissible en milieu isotrope

$$\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_K = d_{K,\sigma} \mathbf{n}_{K,\sigma}$$



On retrouve le schéma à deux points avec moyenne harmonique :

$$F_{K,\sigma}^D = k_\sigma A_\sigma (p_L - p_K) ; \quad \frac{1}{k_\sigma} = \frac{d_{K,\sigma}}{k_K} + \frac{d_{L,\sigma}}{k_L}$$

Relation avec les Éléments Finis Mixtes Hybrides

➤ EFMH sur un triangle avec fonctions de formes RT0

✓ Fonctions RT0 sur triangle

$$\begin{aligned}
 \text{Div}(\mathbf{w}^\sigma) &= 1 & \mathbf{w}^1 &= (\lambda^2 \mathbf{x}^{12} - \lambda^3 \mathbf{x}^{13}) / 2A_K \\
 \mathbf{w}^\sigma \cdot \mathbf{n} &\text{ constant sur } \partial K & \mathbf{w}^2 &= (\lambda^3 \mathbf{x}^{22} - \lambda^1 \mathbf{x}^{21}) / 2A_K \\
 \int_{\sigma'} \mathbf{w}^\sigma \cdot \mathbf{n}_{\sigma'} &= \delta_{\sigma'}^\sigma & \mathbf{w}^3 &= (\lambda^1 \mathbf{x}^{32} - \lambda^2 \mathbf{x}^{32}) / 2A_K
 \end{aligned}
 \quad \forall \mathbf{w} \in RT0 \quad \mathbf{w} = \sum_i (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\sigma_i}) \mathbf{w}^{\sigma_i}$$

✓ Formulation faible de la loi de Darcy

$$\mathbf{k}^{-1} \mathbf{F} = \nabla p \quad \Rightarrow \quad \int_K \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{k}^{-1} \mathbf{F} + \int_{\partial K} p \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{n} - \int_K p \text{Div} \mathbf{w}^* = 0$$

$$\sum_{\sigma \in E_K} F_{K,\sigma} \int_K \mathbf{w}^{\sigma'} \cdot \mathbf{k}^{-1} \mathbf{w}^\sigma + p_{\sigma'} - p_K = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F} = \sum_{\sigma \in E_K} F_{K,\sigma} \mathbf{w}^\sigma \\ \mathbf{w}^* = \mathbf{w}^{\sigma'} \end{array} \right.$$

$$F_{K,\sigma} = \mathbf{M}_K^{-1\sigma,\sigma'} (p_K - p_{\sigma'}) \quad \mathbf{M}_K^{\sigma,\sigma'} = \int_K \mathbf{w}^\sigma \cdot \mathbf{k}^{-1} \mathbf{w}^{\sigma'}$$

➤ Possibilité de programmer des EFMH « lumpés » et décentrés

Interprétation du terme de coercivité

➤ **Problème elliptique :** $-Div(\mathbf{k}\nabla p) = f \Leftrightarrow p = Arg \min \frac{1}{2} \int_K \nabla p^* \mathbf{k} \nabla p^* - \int_K f p^*$

➤ **Minimisation fonctionnelle Sushi :**

$$\langle p, p^* \rangle_D^\alpha = \sum_K \left(A_K \nabla_K p \cdot \mathbf{k}_K \nabla_K p^* + \alpha_{K,\sigma} \sum_{\sigma \in E_K} \gamma_{K,\sigma} R_{K,\sigma}(p) R_{K,\sigma}(p^*) \right)$$

$$p_\alpha = Arg \min \frac{1}{2} \langle p^*, p^* \rangle_D - \int_K f p^*$$

$\lambda =$ valeur "optimale" de α_K

➤ **Point selle fonctionnelle avec contrainte**

$$(p, p^*)_D = \sum_K (A_K \nabla_K p \cdot \mathbf{k}_K \nabla_K p^*)$$

$$G_K^\varepsilon = \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in E_K} \gamma_{K,\sigma} R_{K,\sigma}^2(p) - A_K \varepsilon$$

$$p_G = Arg \min_{G_K^\varepsilon \leq 0} \frac{1}{2} (p^*, p^*)_D - \int_K f p^*$$

(p_λ, λ) point selle du Lagrangien :

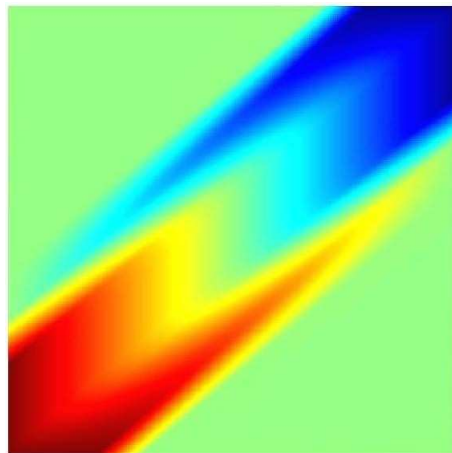
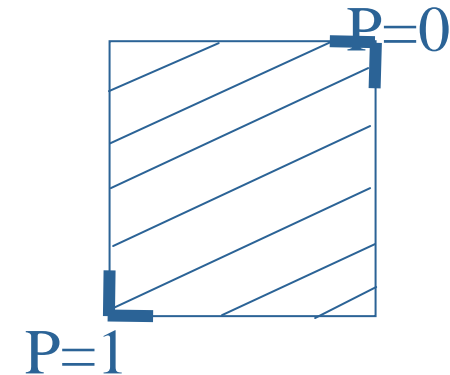
$$L(p^*, \lambda^*) = \frac{1}{2} (p^*, p^*)_D - \int_K f p^* + \int_K \lambda^* G_K^\varepsilon(p^*)$$

$$L(p_\lambda, \lambda^*) \leq L(p_\lambda, \lambda) \leq L(p^*, \lambda) \forall p^* \text{ et } \lambda^* \geq 0$$

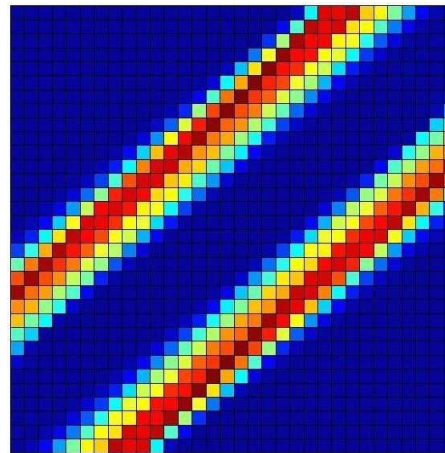
Estimation des termes de coercivité par minimisation de la courbure locale

➤ Mise en place d'un algorithme d'Uzawa

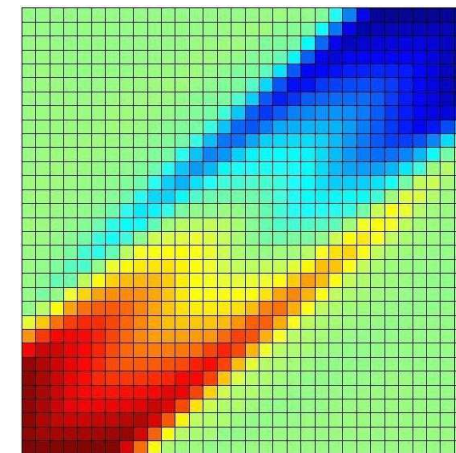
Problème modèle (FVCA 5)
Injection à 45° dans milieu anisotrope 40°



Pression
maillage fin



iso α_K



pression
maillage grossier

Sushi diphasique

➤ Rappel des équations

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\rho_l^w S_l + \rho_g^w S_g)) + Div(\mathbf{F}_l^w + \mathbf{F}_g^w) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\rho_l^a S_l + \rho_g^a S_g)) + Div(\mathbf{F}_l^a + \mathbf{F}_g^a) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathbf{F}_l^w = -k_l^w \mathbf{k} \nabla p_l + \mathbf{J}_l^w; \mathbf{F}_g^w = -k_g \mathbf{k} \nabla p_g + \mathbf{J}_g^w \\ \mathbf{F}_l^a = -k_l^a \mathbf{k} \nabla p_l + \mathbf{J}_l^a; \mathbf{F}_g^a = -k_g \mathbf{k} \nabla p_g + \mathbf{J}_g^a \end{cases} \quad \begin{cases} \mathbf{J}_l^w = -D_l C_l^w \nabla(C_l^w); \mathbf{J}_g^w = -D_g C_g^w \nabla(C_g^w) \\ \mathbf{J}_l^a = -D_l C_l^a \nabla(C_l^a); \mathbf{J}_g^a = -D_g C_g^a \nabla(C_g^a) \end{cases}$$

➤ Le calcul des mobilités décentrées :

$$\frac{A_K}{\Delta t} (m^a - m^a) - \sum_{\sigma \in E_k} F_{l,K,\sigma}^{aD} - \sum_{\sigma \in E_k} F_{g,K,\sigma}^{aD} = 0$$

A évaluer sur les faces des mailles

Contient des quantités discontinues non linéaires : $\rho, k^{rel} \longrightarrow$ décentrage amont

Une quantité constante discontinue : $\mathbf{k} \longrightarrow$ schéma

Discrétisation des flux en diphasique

➤ Cas linéaire

$$\frac{\partial(m)}{\partial t} + Div(\mathbf{F}) = 0$$

$$\mathbf{F} = -\mathbf{k}\nabla p$$

$$F_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} \mathbf{k}\nabla p \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$$

⇒ $\mathbf{k}\nabla p$ continu

Cas non linéaire immiscible

$$\frac{\partial(m)}{\partial t} + Div(\mathbf{F}) = 0$$

$$\mathbf{F} = -k(p)\mathbf{k}\nabla p$$

$$F_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} k(p)\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_{K,\sigma}$$

⇒ $\mathbf{F}\cdot\mathbf{n}_{\sigma}$ continu

$$F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0$$

**non linéaire :
peut dégénérer**

$$F_{K,\sigma}^n + F_{L,\sigma}^n \neq 0$$

En cours de Newton :

$$F_{K,\sigma}^n > 0 \text{ et } F_{L,\sigma}^n > 0$$

incohérence décentrage

$$F_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} \mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_{K,\sigma}$$

$$F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0 \quad \text{linéaire}$$

$$\mathbf{F}\cdot\mathbf{n}_{\sigma} = k_{\sigma} F_{K,\sigma}$$

Continu par
décentrage

Continu par
schéma

Discrétisation des termes diffusifs

➤ Cas diphasique miscible

$$\frac{\partial(m)}{\partial t} + \text{Div}(\mathbf{F}) = 0$$
$$\mathbf{F} = -k(p)\mathbf{k}\nabla p + \mathbf{J}$$

➤ On reprend le choix de l'immiscible et on utilise une moyenne pour les termes diffusifs

$$F_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$$

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_{\sigma} = k_{\sigma} F_{K,\sigma} + \frac{1}{2} (\mathbf{J}_K + \mathbf{J}_L) \cdot \mathbf{n}_{\sigma}$$

- + stabilité
- - élargit connectivité

Conclusions

- Modules diphasiques éprouvés en EF
- Choix des variables et traitement du passage saturé/non saturé satisfaisant
- Problèmes numériques liés aux distorsions de maillage
- Justifie développement d'une méthode de VF pour maillage quelconque
- Évolutions logicielles pour introduire VF dans Code_Aster
- Schéma Sushi en cours de développement
 - ✓ Formulation diphasique terminée et codée
 - ✓ En cours de validation