Schémas volumes finis SUSHI pour la modélisation des écoulements insaturés miscibles

Résumé :

Cette note présente brièvement les schémas volumes finis développés dans Code_Aster. Un bref rappel des équations de comportement concernées est effectué puis les schémas utilisés sont présentés.

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

Table des matières

1 Introduction....3
2 Présentation du problème : Hypothèses, Notations....3
2.1 Cadre de modélisation....3
2.2 Notations....3
2.2.1.1 Variables d'état....4
2.2.1.2 Grandeurs caractéristiques de la phase solide....4
2.2.1.3 Grandeurs caractéristiques des fluides....4
2.3 Équations constitutives du modèle....5
2.3.1 Équations d'équilibre....5
2.3.2 Équations de comportement....5
2.3.2.1 Lois de comportement des fluides....5
2.3.2.2 Équations de diffusion....6
3 Les schémas volumes finis mis en œuvre dans Code_Aster....7
3.1 Généralités sur les volumes finis....7
3.2 Les volumes finis SUSHI appliqués aux écoulements diphasiques miscibles....7
3.2.1 Choix des inconnues....8
3.2.2 Choix du volume de contrôle....8
3.2.3 Écriture des flux....8
3.2.4 Décentrage....10
4 Mise en œuvre dans Code_Aster....13
4.1 Description des éléments....13
4.2 Calcul des contraintes et déformations généralisées....14
4.3 Intégration....15
4.4 Variables internes....16
4.5 Validation....16
5 Bibliographie....17
6 Description des versions du document....17

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

1 Introduction

Nous présentons ici les schémas volumes finis SUSHI développés pour la modélisation des écoulements diphasiques (insaturés) miscibles en milieu poreux, miscibles signifiant ici que les composants peuvent exister sous plusieurs phases. Ces schémas concernent la famille des modélisations THM. Ils ne sont prévus que pour l'hydraulique pure (ni mécanique, ni thermique), soit si on reprend la nomenclature classique décrite dans [R7.01.11] le KIT_HH.

Les schémas volumes finis SUSHI (Scheme Using Stabilization and Hybrid Interfaces) ont été développés par Ophélie Angelini dans le cadre de sa thèse [1] pour traiter notamment des problèmes de fronts raides sur des maillages quelconques. Ce schéma est inspiré du schéma Hybid Finite Volume (HVF) introduit par R. Eymard et al.[4]. A l'origine de ce travail, se trouvait une abondante littérature indiquant que ces schémas assurant par définition une bonne représentation du flux étaient plus adaptés à ce type d'équations hyperboliques appliquées à des domaines fortement hétérogènes. Implanter et disposer de tels schémas a donc vite paru raisonnable ne serait ce que pour se comparer avec les membres de la communauté des écoulements en milieu poreux [2]. Ces schémas ne prétendent pas remplacer les éléments finis mais proposent une alternative robuste.

Nous ne présenterons ici que brièvement le modèle physique des écoulements diphasiques détaillé dans la documentation [R7.01.11].

Cette documentation présente donc essentiellement les schémas de discrétisation spatiale Volumes Finis mis en œuvre sur ces modèles dans Code_Aster. Pour de plus amples détails, on se réfèrera à la thèse d'Ophélie Angélini [1]

2 Présentation du problème : Hypothèses, Notations

L'ensemble du modèle physique hydraulique est présenté en détail dans R7.01.11. On se contente ici de rappeler les principales variables et hypothèses ainsi que les équations traitées. Le formalisme est essentiellement issu des travaux de Coussy [5]. Les routines gérant les lois de comportement ne sont pas impactées par l'utilisation du schéma volume fini.

2.1 Cadre de modélisation

Ces développements ne concernent que les modèles à 2 phases (liquide gaz) et 2 composants miscibles (par exemple eau et hydrogène). Nous nous plaçons donc dans le cadre des modélisations *_HH2 (cf. U2.04.05). Plus précisément on parlera ici de modélisation HH2SUDA (cf. section 4).

On rappelle que les 2 lois de comportement hydrauliques que l'on peut utiliser sont alors :

- LIQU_AD_GAZ_VAPE : 2 composants par phase
- LIQU_AD_GAZ : 2 composants dans la phase liquide, un seul dans la phase gaz (vapeur négligée)

Dans la suite on ne parlera que du modèle complet à 2 composants, 2 phases. Le cas sans vapeur revient juste à annuler les termes la concernant.

2.2 Notations

Nous supposons que les pores du solide sont occupés par deux constituants notés w (pour l'eau) et h (pour l'hydrogène), chacun coexistant dans deux phases au maximum, l'une liquide notée l et l'autre gazeuse notée g.

Les grandeurs A associées à la phase p ($p=l,g$) du composant c seront notées : X_p^c.

Concrètement, cela donne :

- A_l^w : grandeur A pour l'eau liquide,

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

- A_g^w : grandeur A pour la vapeur d'eau,
- A_l^h : grandeur A pour le composant h dissous dans le liquide,
- A_g^h : grandeur A pour le composant h sous forme gazeuse (par ex. hydrogène sec).

Les hypothèses générales effectuées sont les suivantes :

- comportement anisotrope,
- les gaz sont des gaz parfaits,
- mélange idéal de gaz parfaits (pression totale = somme des pressions partielles),
- équilibre thermodynamique entre les phases d'un même constituant.

Les différentes notations sont explicitées ci-après.

2.2.1.1 Variables d'état

Les variables sont :

- les pressions de chaque constituants P_p^c
- la température du milieu T.

Ces différentes variables ne sont pas totalement indépendantes. En effet, si l'on considère un seul constituant, l'équilibre thermodynamique entre ses phases impose une relation entre la pression de la vapeur et la pression du liquide de ce constituant. Finalement, il n'y a qu'une seule pression indépendante par constituant, de même qu'il n'y a qu'une seule équation de conservation de la masse. Le nombre de pressions indépendantes est donc égal au nombre de constituants indépendants. Le choix de ces pressions est libre (combinaisons des pressions des constituants) à condition que les pressions choisies, associées à la température, forment un système de variables indépendantes.

Nous avons choisi - et afin d'être homogène avec la formulation éléments finis - comme variables indépendantes et descriptives du milieu :

- la pression totale du gaz $P_g = P_g^w + P_g^h$, (loi de Dalton)
- La pression totale de liquide $P_l = P_l^w + P_l^h$
- la pression capillaire $P_c = P_g - P_l = P_g^w + P_g^h - (P_l^w + P_l^h)$.

2.2.1.2 Grandeurs caractéristiques de la phase solide

On note :

La porosité : ϕ ,

Le tenseur de perméabilité intrinsèque : $\boldsymbol{k}$

2.2.1.3 Grandeurs caractéristiques des fluides

On note :

- La masse volumique de la phase p : ρ_p , $\rho_p = \rho_p^w + \rho_p^h$
- La viscosité de la phase p : μ_p
- La saturation de la phase p : , $S_l + S_g = 1$ qui est une fonction décroissante de la pression capillaire. On a donc $S_l = f(P_c)$.
- La perméabilité relative de la phase p : k_{rp} fonction de la saturation

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

- La conductivité hydraulique de la phase p : λ_p^H telle que : $\lambda_p^H = \frac{\boldsymbol{k}\, k_{rp}}{\mu_p}$
- La mobilité du composant $c, c=(h,w)$ associé à la phase p $k_p^c = \frac{\rho_p^c k_{rp}}{\mu_p}$
- La masse molaire du composant c : M^c
- La concentration molaire $c_p^c = \frac{\rho_p^c}{M^c}$
- La fraction massique de la phase p et du composant c : $\zeta_p^c = \frac{\rho_p^c}{\rho_p}$
- La fraction molaire : $X_p^c = \frac{c_p^c}{c_p}$ où $c_p = c_p^h + c_p^w$ (dans la littérature, ces concentrations sont parfois également notées C_p^c)
- Le module de compressibilité de l'eau K_w

2.3 Équations constitutives du modèle

On ne donnera pas ici les détails permettant d'arriver aux équations finales du modèle. Pour les étapes intermédiaires, on se réfèrera à [R7.01.11]. On se contente donc ici d'un rappel succinct des principales équations.

2.3.1 Équations d'équilibre

Les équations d'équilibre sont ici données par la conservation de la masse de chaque constituant, soit :

$$\begin{cases} \dot{m}_l^w + \dot{m}_g^w + Div\left(\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{l}}^{\boldsymbol{w}} + \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{g}}^{\boldsymbol{w}}\right) = 0 \\ \dot{m}_l^h + \dot{m}_g^h + Div\left(\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{l}}^{\boldsymbol{h}} + \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{g}}^{\boldsymbol{h}}\right) = 0 \end{cases}$$

avec m_p^c l'apport massique du constituant c en phase p, telle que $m_p^c = \phi . S_p . \rho_p^c$ et $\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{p}}^{\boldsymbol{c}}$ le flux massique de la phase p pour le constituant c.

$\boldsymbol{F}_p^c$ est constitué du flux massique Fickien $\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{p}}^{\boldsymbol{c}}$ et du flux massique Darcéen $\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{p}}$ tel que :

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{p}}^{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{p}}^{\boldsymbol{c}} + \rho_p^c \frac{\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{p}}}{\rho_l}, c=(h,w); p=(l,g)$$

2.3.2 Équations de comportement

2.3.2.1 Lois de comportement des fluides

Évolution de la porosité :

En l'absence de mécanique, on permet néanmoins une évolution de la porosité via le coefficient d'emmagasinement E_m, telle que :

$$d\phi = E_m d P_l$$

Comportement du liquide :

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

On considère que l'eau peut être compressible : $\frac{d\,\rho_l^w}{\rho_l^w}=\frac{dP_l^w}{K_w}$

Comportement du gaz :

On considère que le gaz est soumis à la loi des gaz parfaits :
$\frac{P_g^c}{\rho_g^c}=\frac{RT}{M^c}; c=(w,h)$ où R est la constante des gaz parfaits.

Loi d'équilibre eau vapeur :

l'équilibre eau vapeur s'écrit par égalité des enthalpies libres, ce qui, pour un problème isotherme donne (confer R7.01.11) :

$$\frac{d\,P_g^w}{\rho_g^w}=\frac{dP_l^w}{\rho_l^w}$$

Loi d'équilibre gaz sec /dissous :

La loi de Henry relie le composant c sous sa forme gazeuse à sa forme liquide telle que :
$P_g^h=K_h\frac{\rho_l^h}{M^h}$ où K_h coefficient de Henry.

Remarque : on trouve souvent ce coefficient dans la littérature sous la forme $H=\frac{1}{K_h}$

2.3.2.2 Équations de diffusion

Loi de Darcy :

La loi de Darcy relie le flux $\boldsymbol{F_p}$ de la phase p à son gradient de pression, tel que :

$$\frac{\boldsymbol{F_p}}{\rho_p}=\frac{-\boldsymbol{k}\,k_{rp}}{\mu_p}\left(\nabla P_p-\rho_p\boldsymbol{g}\right)$$
avec $\boldsymbol{g}$ la gravité

Loi de Fick :

On écrit les flux massiques Fickiens tels que :
$\boldsymbol{J_p^c}=-\phi M^c S_p D_p c_p \nabla X_p^c$ où D_p est le coefficient de diffusion (où coefficient de Fick) de la phase p.

On néglige le flux Fickien de l'eau dans le liquide (concentration de l'eau dans le liquide assimilable à 1). Au final, on obtient donc :

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F_l^w}&=-\rho_l^w\lambda_l^H\left(\nabla P_l-\rho_l\boldsymbol{g}\right)\\
\boldsymbol{F_l^h}&=-\rho_l^h\lambda_l^H\left(\nabla P_l-\rho_l\boldsymbol{g}\right)-\phi M^h S_l c_l D_l\nabla X_l^h\\
\boldsymbol{F_g^w}&=-\rho_g^w\lambda_g^H\left(\nabla P_g-\rho_g\boldsymbol{g}\right)-\phi M^w S_g c_g D_g\nabla X_g^w\\
\boldsymbol{F_g^h}&=-\rho_g^h\lambda_g^H\left(\nabla P_g-\rho_g\boldsymbol{g}\right)-\phi M^h S_g c_g D_g\nabla X_g^h
\end{aligned}$$

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

3 Les schémas volumes finis mis en œuvre dans *Code_Aster*

Nous présentons dans ce chapitre les schémas volumes finis qui ont été mis en œuvre dans Code_Aster.

3.1 Généralités sur les volumes finis

La méthode des volumes finis consiste à intégrer une ou plusieurs équations sur un volume de contrôle puis à discrétiser les flux sur chaque arête de ces volumes. Contrairement aux éléments finis, il n'y a pas a proprement parlé de formule variationnelle.
Prenons l'exemple d'une équation de la forme $div(\Theta(X,u,\nabla u))=f(x)$. Son approximation sur un ensemble $\Omega\subset\mathbb{R}^n$ est une fonction constante par morceaux sur un découpage de Ω en volumes de contrôles notés par la suite K.
Le principe de la méthode des volumes finis est d'intégrer l'équation sur chacun de ces volumes de contrôle. En utilisant la formule de Green, les équations s'écrivent :

$$\int_{\partial K}\Theta(X,u,\nabla u).n_K d\gamma=\int_K f(x)dx,\forall K$$

avec n_K la normale unitaire sortante du volume de contrôle K.

On voit alors qu'appliquer un schéma volumes finis consiste à approcher des flux sur des bords.
Pour une équation transitoire du type :
$\frac{\partial u}{\partial t}+div(\Theta(X,u,\nabla u))=f(x)$, on aura logiquement une formulation du type
$\int_K u\,dx+\int_{\partial K}\Theta(X,u,\nabla u).n_K d\gamma=\int_K f(x)dx,\forall K$

En résumé, une schéma volumes finis est défini par :

- Le choix du volume de contrôle K qui peut être identique à la maille, ou bien une construction (de type Voronoï par exemple). La solution approchée donnée par les schémas de type volumes finis sera constante par morceaux sur ce découpage.
- La position des nœuds d'approximation des inconnues pour chaque volume.
- La manière d'approcher le flux sur une arête du volume de contrôle : Ils sont approchés par la formulation intégrale des équations et l'application de la formule de Green sur le bord du volume de contrôle. Lors de l'approximation, les flux doivent être conservatifs et consistants. La conservativité se traduit par la continuité des flux à l'interface, par définition assurée par les volumes finis (le flux est écrit explicitement). La consistance est atteinte lorsque la différence entre le flux réel et son approximation tend vers 0. Il existe un très grand nombre de schémas suivant la façon de calculer ce flux et la consistance requise.

L'écriture du flux peut donc relier des nœuds qui n'appartiennent pas forcement au même élément. Ils peuvent être reliés par exemple par une interface commune. On voit donc que dans ce cas, deux nœuds sont reliés, non plus quand ils appartiennent au même élément comme en éléments finis, mais quand ils appartiennent à deux voisins (reliés par une face commune).

Pour mettre en œuvre la plupart de ces schémas il faut donc avoir recours à la notion topologique de voisinage ce qui constitue une différence importante par rapport aux éléments finis.

3.2 Les volumes finis SUSHI appliqués aux écoulements diphasiques miscibles

Les écoulements diphasiques en milieu poreux sont régis par le système d'équations (3.2.1) :

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

$$\begin{cases} \dot{m}_l^w + \dot{m}_g^w + Div\left(\boldsymbol{F}_l^{\boldsymbol{w}} + \boldsymbol{F}_g^{\boldsymbol{w}}\right) = 0 \\ \dot{m}_l^h + \dot{m}_g^h + Div\left(\boldsymbol{F}_l^{\boldsymbol{h}} + \boldsymbol{F}_g^{\boldsymbol{h}}\right) = 0 \\ P_l(\boldsymbol{x}, t) = \tilde{P}_l \quad sur \quad \partial\Omega_d \\ S_l(\boldsymbol{x}, t) = \tilde{S}_l \quad sur \quad \partial\Omega_d \\ [\boldsymbol{F}_l^{\boldsymbol{w}} + \boldsymbol{F}_g^{\boldsymbol{w}}].\boldsymbol{n} = \phi^w \quad sur \quad \partial\Omega_n \\ [\boldsymbol{F}_l^{\boldsymbol{h}} + \boldsymbol{F}_g^{\boldsymbol{h}}].\boldsymbol{n} = \phi^h \quad sur \quad \partial\Omega_n \end{cases} \tag{3.2.1}$$

On rappelle par ailleurs que l'expression des apports massiques est :

$$\begin{aligned} m_w &= \rho_w \varphi S_{lq} - \rho_w^0 \varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{ad} &= \rho_{ad} \varphi S_{lq} - \rho_{ad}^0 \varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{as} &= \rho_{as} \varphi \left(1 - S_{lq}\right) - \rho_{as}^0 \varphi^0 \left(1 - S_{lq}^0\right) \\ m_{vp} &= \rho_{vp} \varphi \left(1 - S_{lq}\right) - \rho_{vp}^0 \varphi^0 \left(1 - S_{lq}^0\right) \end{aligned} \tag{3.2.2}$$

les flux sont alors :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_l^{\boldsymbol{w}} &= -\rho_l^w \lambda_l^H \left(\nabla P_l - \rho_l \boldsymbol{g}\right) \\ \boldsymbol{F}_l^{\boldsymbol{h}} &= -\rho_l^h \lambda_l^H \left(\nabla P_l - \rho_l \boldsymbol{g}\right) - \phi M^h S_l c_l D_l \nabla X_l^h \\ \boldsymbol{F}_g^{\boldsymbol{w}} &= -\rho_g^w \lambda_g^H \left(\nabla P_g - \rho_g \boldsymbol{g}\right) - \phi M^w S_g c_g D_g \nabla X_g^w \\ \boldsymbol{F}_g^{\boldsymbol{h}} &= -\rho_g^h \lambda_g^H \left(\nabla P_g - \rho_g \boldsymbol{g}\right) - \phi M^h S_g c_g D_g \nabla X_g^h \end{aligned} \tag{3.2.3}$$

3.2.1 Choix des inconnues

Le choix habituel d'inconnues (P_c, P_g) est retenu dans la maille ainsi que sur les arêtes de celle-ci. Ce choix est par ailleurs compatible avec le traitement unifié des écoulements miscibles et immiscibles en milieu saturé et insaturé (voir [1]).

3.2.2 Choix du volume de contrôle

Le volume de contrôle correspond ici au maillage : un élément est égal à un volume de contrôle.

3.2.3 Écriture des flux

Les notations géométriques utilisées par la suite pour un élément K (ici triangulaire, mais le principe est le même pour des rectangle ou en 3D) sont indiquées Illustration 1.
On notera par la suite L le triangle voisin à K séparé par l'interface σ. On rappelle que la notation $|K|$ désigne sa mesure (ou surface).

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

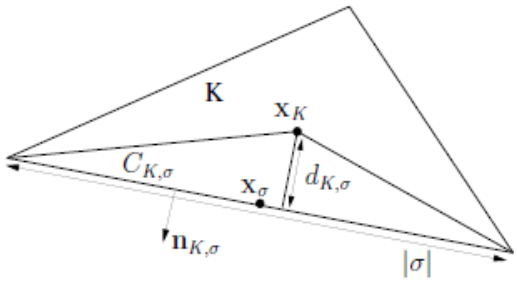


Illustration 1: Représentation des différentes quantités

Nous pouvons distinguer différents types de flux que nous nommerons par la suite flux « massiques » ou flux « volumiques ». Les flux massiques sont en réalité les flux « physiques » classiques autrement dit ce sont les quantités $\int_{\partial K} -\boldsymbol{k} k_p^c \nabla [P_p - \rho_p \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}].\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}} d\gamma$ pour les termes Darcéens et $\int_{\partial K} -\phi M^c S_p D_p(S_p) c_p \nabla X_p^c.\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}} d\gamma$ pour les termes Fickiens.
En revanche, les flux volumiques sont pour les termes Darcéens les quantités $\int_{\partial K} -\boldsymbol{k} \nabla [P_p - \rho_p \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}], \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}} d\gamma$ et pour les termes Fickiens les quantités $\int_{\partial K} -\nabla X_p^c.\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}} d\gamma$. Concrètement, on extrait les termes dépendant de l'espace (via la saturation) du calcul du flux volumique.

Un des choix réalisés pour l'extension du schéma SUSHI au cas non linéaire diphasique est d'approximer par des flux discrets les flux volumiques plutôt que les flux massiques. Ce choix a l'avantage de pouvoir conduire à une équation de continuité des flux volumiques linéaires. Cependant, il faut alors assurer la continuité des autres quantités discontinues pas d'autres techniques (par exemple, par décentrage ou par moyenne). Ces différentes approches sont comparées dans [1].

On note alors la discrétisation des flux volumique telle que :

- $\int_{\partial K} -\boldsymbol{k} \nabla [P_p - \rho_p \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}], \boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}} d\gamma$ est discrétisé par $\Sigma_{\sigma \in \epsilon_K} F_{p,K,\sigma}(P_p - \rho_p \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}), p \in (l,g)$ (on somme les flux pour chaque bord σ appartenant à l'ensemble des arrêtes de K : ϵ_K).
- $\int_{\partial K} -\nabla X_p^c.\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}} d\gamma$ est discrétisé par $\Sigma_{\sigma \in \epsilon_K} \tilde{F}_{p,K,\sigma}(X_p^c), c \in (h,w), p \in (l,g)$.

Les flux volumiques discrétisés s'expriment donc de la manière suivante :

$$F_{p,K,\sigma}(P_p - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}) = \Sigma_{\sigma' \in \epsilon_K} C_K^{\sigma,\sigma'} [P_{p,K} - P_{p,\sigma'} - \rho_{p,K} \boldsymbol{g}.[\boldsymbol{x}_K - \boldsymbol{x}_{\sigma'}]] \quad (3.2.4)$$

$$\tilde{F}_{p,K,\sigma}(X_p^c) = \sum_{\sigma' \in \epsilon_K} D_K^{\sigma,\sigma'} [X_{p,K}^c - X_{p,\sigma'}^c] \quad (3.2.5)$$

Avec

$$C_K^{\sigma,\sigma'} = \sum_{\sigma'' \in \epsilon_K} \boldsymbol{Y}^{\boldsymbol{\sigma}'',\boldsymbol{\sigma}}.\boldsymbol{k}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}''} \boldsymbol{Y}^{\boldsymbol{\sigma}'',\boldsymbol{\sigma}'} \quad (3.2.6)$$

$$D_K^{\sigma,\sigma'} = \sum_{\sigma'' \in \epsilon_K} \boldsymbol{Y}^{\boldsymbol{\sigma}'',\boldsymbol{\sigma}}.\frac{d_{K,\sigma''}|\sigma'|}{d} \boldsymbol{Y}^{\boldsymbol{\sigma}'',\boldsymbol{\sigma}'} \quad (3.2.7)$$

Où :

$$\boldsymbol{k}_{\boldsymbol{K},\boldsymbol{\sigma}''} = \int_{C_{K,\sigma}} \boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{K}} \frac{d_{K,\sigma''}|\sigma'|}{d} \quad (3.2.8)$$

Et :

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

$$\boldsymbol{Y}^{\sigma,\sigma'}=\frac{|\sigma|}{|K|}\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\sigma}+\frac{\beta_K}{d_{k,\sigma}}[1-\frac{|\sigma|}{|K|}\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\sigma}.[\boldsymbol{x}_{\sigma}-\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{K}}]]\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k},\sigma} \quad si \quad \sigma=\sigma' \tag{3.2.9}$$

$$\boldsymbol{Y}^{\sigma,\sigma'}=\frac{|\sigma'|}{|K|}\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\sigma'}-\frac{\beta_K}{d_{k,\sigma}|K|}|\sigma'|\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{K},\sigma}.[\boldsymbol{x}_{\sigma}-\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{K}}]\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{k},\sigma} \quad si \quad \sigma\neq\sigma' \tag{3.2.10}$$

Le choix de discrétiser par la méthode des Volumes Finis SUSHI uniquement les flux volumiques conduit à devoir traiter de manière spécifique les mobilités ainsi que les termes de diffusion Fickiens. En effet, les perméabilités relatives ainsi que les tenseurs de diffusion, présents respectivement dans les mobilités et dans les termes de diffusion Fickiens, sont des quantités qui dépendent de la saturation et qui peuvent être hétérogènes.

Nous allons présenter différentes formulations possibles de la discrétisation des équations qui régissent les écoulements en milieu poreux, résultant de différents décentrages des quantités non linéaires.

On notera par la suite :

- L'équation discrétisée de conservation de l'eau sur l'élément K : R_K^w
- L'équation discrétisée de conservation du composant gaz sur l'élément K : R_K^h
- L'équation discrétisée de continuité du flux d'eau à travers l'interface σ : R_σ^w
- L'équation discrétisée de continuité du flux du composant gazeux à travers l'interface σ : R_σ^h

3.2.4 Décentrage

Le phénomène dominant dans les écoulements diphasiques en milieu poreux est la diffusion Darcéenne, nous nous focaliserons donc sur l'étude de la continuité des mobilités $\rho_p\frac{k_{r,p}}{\mu_p}$. Les termes de diffusion Fickiens seront regardés en second lieu afin uniquement d'assurer leur continuité une fois celle des mobilités assurée.

Lorsque nous sommes en présence de termes non linéaires qui dépendent de l'espace, ici les mobilités, nous devons assurer leur continuité en cas de problème hétérogène. Pour cela nous pouvons les décentrer. Le décentrage des mobilités a pour objectif d'assurer la monotonie et la stabilité des schémas. Cependant, il diminue la précision des calculs en ajoutant de la diffusion numérique. Il existe de nombreux décentrages dans la littérature, le terme non linéaire de mobilité $\rho_p\frac{k_{r,p}}{\mu_p}$ dépendant de l'espace, pouvant être calculé par différents schémas :

- le schéma amont qui décentre ce terme en fonction du sens de l'écoulement de la phase dans la maille courante ou dans la maille voisine par l'arête considérée,
- le schéma causal qui va décentrer différemment ce terme lorsqu'il est facteur d'un terme de pression ou facteur d'un terme de gravité. Le décentrage se fera tout de même dans la maille courante ou dans la maille voisine,
- le schéma à nombre de Péclet variable qui permet de décomposer la partie convective du flux en une combinaison linéaire entre le flux décentré du schéma amont et le flux centré. Ainsi le paramètre de cette combinaison peut être ajusté localement sur chaque arête en fonction de la diffusion introduite par la pression capillaire.

Nous présenterons ci-dessous la formulations retenue dans Code_Aster.
Initialement 3 formulations ont été implémentées dans Code_Aster : deux d'entre elles vont décentrer par le schéma amont les mobilités, soit sur l'arête de la maille courante soit sur la maille voisine par l'arête et la troisième formulation va utiliser des mobilités centrées dans la maille courante.
Nous avons décidé de conserver une unique formulation (pour des raison de stabilité et de temps de calcul) : la formulation décentré arête.

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

Formulation : schéma Volumes Finis Décentré Arête (VFDA)

L'intérêt de cette formulation est à la fois de garder la notion de décentrage, tout en gardant un stencil de la matrice jacobienne petit. Pour cela, nous continuons d'écrire la continuité des flux totaux massiques mais nous décentrons les mobilités sur les arêtes de la maille courante. Nous considérons donc la continuité des quantités suivantes :

$$\int_{\partial K}\left[-\boldsymbol{k}\, k_l^w \nabla\left[P_l-\rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}\right]-\boldsymbol{k}\, k_g^w \nabla\left[P_g-\rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}\right]-\phi M^w S_g D_g c_g \nabla X_g^w\right].\boldsymbol{n}_{K,\sigma}\, d\gamma$$

et

$$\int_{\partial K}\left[-\boldsymbol{k}\, k_l^h \nabla\left[P_l-\rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}\right]-\boldsymbol{k}\, k_g^h \nabla\left[P_g-\rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}\right]-\phi M^h S_g D_g c_g \nabla X_g^h-\phi M^h S_l D_l c_l \nabla X_l^h\right].\boldsymbol{n}_{K,\sigma}\, d\gamma$$

Le décentrage s'écrit alors :

$$\begin{aligned} &Si \quad F_{p,K,\sigma}\geqslant 0 \quad alors \quad k^c_{p,K,\sigma}=k^c_p(P_{p,K}) \\ &Si \quad F_{p,K,\sigma}<0 \quad alors \quad k^c_{p,K,\sigma}=k^c_p(P_{p,\sigma}) \end{aligned} \qquad (3.2.11)$$

En ce qui concerne les termes de diffusion Fickiens, étant donné que la diffusion moléculaire n'est pas le phénomène dominant, nous décidons de ne pas leur appliquer de traitement particulier et nous prendrons donc leurs valeurs dans la maille courante.

Ainsi nous pourrons, dans cette formulation, ne pas faire la distinction entre les arêtes internes et les arêtes de bords. Un bémol à cette formulation pourrait être qu'au final nous assurons doublement la continuité des flux massiques Darcéens puisqu'ils sont continus grâce aux équations de la continuité des flux mais également grâce à leur écriture dans la conservation de la masse.

Malgré cela cette formulation semble pouvoir être performante. En effet, elle n'utilise pas les voisins des arêtes, ce qui lui permet d'avoir un temps de résolution faible. Par ailleurs, elle permet de résoudre des problèmes hétérogènes.

La discrétisation des deux premières équations du système (3.2.1)s'écrit de la manière suivante :

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

$$
\begin{aligned}
&eq.\ R_K^w:\\
&\frac{|K|}{\Delta t}[m_{l,K}^w - m_{l,K}^{w,-}] + \frac{|K|}{\Delta t}[m_{g,K}^w - m_{g,K}^{w,-}] + \sum_{\sigma\in\epsilon_{K,ext}}[k_{l,K,\sigma}^w F_{l,K,\sigma}(P_l - \rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})]\\
&+\sum_{\sigma\in\epsilon_{K,ext}}[k_{g,K,\sigma}^w F_{g,K,\sigma}(P_g - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}) + \phi_K M^w S_{g,K} D_{g,K,\sigma} c_{g,K} \tilde{F}_{g,K,\sigma}(X_g^w)] = 0\\
&eq.\ R_\sigma^w:\\
&k_{l,K,\sigma}^w F_{l,K,\sigma}(P_l - \rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}) + k_{g,K,\sigma}^w F_{g,K,\sigma}(P_g - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})\\
&+\phi_K M^w S_{g,K} D_{g,K,\sigma} c_{g,K} \tilde{F}_{g,K,\sigma}(X_g^w) + k_{l,L,\sigma}^w F_{l,L,\sigma}(P_l - \rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})\\
&+k_{g,L,\sigma}^w F_{g,L,\sigma}(P_g - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}) + \phi_L M^w S_{g,L} D_{g,L,\sigma} c_{g,L} \tilde{F}_{g,L,\sigma}(X_g^w) = 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&eq.\ R_K^h:\\
&\frac{|K|}{\Delta t}[m_{l,K}^h - m_{l,K}^{h,-}] + \frac{|K|}{\Delta t}[m_{g,K}^h - m_{g,K}^{h,-}] + \sum_{\sigma\in\epsilon_{K,inter}}[k_{l,K,\sigma}^h F_{l,K,\sigma}(P_l - \rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})]\\
&+\sum_{\sigma\in\epsilon_{K,inter}}[k_{g,K,\sigma}^h F_{g,K,\sigma}(P_g - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})] + \sum_{p\in(l,g)} \phi_K M^h S_{p,K} D_{p,K,\sigma} c_{p,K} \tilde{F}_{p,K,\sigma}(X_p^h)\\
&=0\\
&eq.\ R_\sigma^h:\\
&k_{l,K,\sigma}^h F_{l,K,\sigma}(P_l - \rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}) + k_{g,K,\sigma}^h F_{g,K,\sigma}(P_g - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})\\
&+\phi_K M^h S_{g,K} D_{g,K,\sigma} c_{g,K} \tilde{F}_{g,K,\sigma}(X_g^w) + \phi_K M^h S_{l,K} D_{l,K,\sigma} c_{l,K} \tilde{F}_{l,K,\sigma}(X_l^w)\\
&k_{l,L,\sigma}^h F_{l,L,\sigma}(P_l - \rho_l \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x}) + k_{g,L,\sigma}^h F_{g,L,\sigma}(P_g - \rho_g \boldsymbol{g}.\boldsymbol{x})\\
&+\phi_L M^h S_{g,L} D_{g,L,\sigma} c_{g,L} \tilde{F}_{g,L,\sigma}(X_g^w) + \phi_L M^h S_{l,L} D_{l,L,\sigma} c_{l,L} \tilde{F}_{l,L,\sigma}(X_l^w) = 0
\end{aligned}
\qquad (3.2.12)
$$

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

4 Mise en œuvre dans Code_Aster

Dans ce chapitre, nous précisons comment sont intégrées les relations décrites au chapitre 3.

Attention les volumes finis ne sont actuellement disponibles qu'avec la loi de couplage hydraulique HYDR_VGM qui permet de gérer correctement l'apparition/disparation de phase en traitant des pressions capillaires négatives. Les seuls modèles hydrauliques aujourd'hui disponibles sont donc du type Mualem Van-Genuchten.

4.1 Description des éléments

2 types de modélisations existent suivant le schéma utilisé :

Modélisation	Schéma correspondant	Loi d'écoulement compatible
D_PLAN_HH2SUDA	VFDA	LIQU_AD_GAZ_VAPE, LIQU_AD_GAZ
3D_HH2SUDA	VFDA	LIQU_AD_GAZ_VAPE, LIQU_AD_GAZ

Tableau 4.1-1: Modèles volumes finis

Les inconnues principales sont la pression capillaire (PRE1) et la pression de gaz (PRE2) et se situent au centre des mailles ainsi qu'aux milieux des arêtes (cf. Illustration 2).

Illustration 2: Elément quadratique

Ce qui donne donc pour un quadrangle un stockage de la sorte :

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

Support	DDL
Face $\sigma 1$	PRE1
	PRE2
Face $\sigma 2$	PRE1
	PRE2
Face $\sigma 3$	PRE1
	PRE2
Face $\sigma 4$	PRE1
	PRE2
Centre K	PRE1
	PRE2

Tableau 4.1-2: Stockage des inconnues

Les éléments mailles sont définis en 2D pour des triangles à 7 nœuds et des quadrilatères à 9 nœuds (sommets « inutilisés »+ milieux des arrêtes + centre) ainsi qu'en 3D pour des hexaèdres à 27 nœuds. On ne dispose pas d'éléments de maillages qui excluraient les nœuds sommets mais ces derniers ne sont pas pris en compte (cf. Illustration 2).

4.2 Calcul des contraintes et déformations généralisées

Les schémas volumes finis bénéficient largement de la structure définie pour les éléments finis en [R7.01.10] et [R7.01.11].

Ainsi les contraintes généralisées au centre de l'élément sont physiquement les mêmes qu'en éléments finis, à savoir :
$m_l^w, \mathbf{F_l^w}; m_g^w, \mathbf{F_g^w}; m_g^h, \mathbf{F_g^h}; m_l^h, \mathbf{F_l^h}$ ainsi que les déformations généralisées : $p_c, \nabla p_c; p_g, \nabla p_g$.

Aux interfaces en revanche, les flux contiennent en fait le nécessaire à l'équation de continuité. Ce dernier peut être différent selon le schéma utilisé (voir section 3.2.4).

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

Nom de composante Aster	Contenu au centre de K	Contenu sur les faces $\sigma \in \delta K$
M11	$\rho_l^w \varphi S_l - (\rho_l^w \varphi S_l)^-$	0
FH11*	$\sum_{\delta K} \boldsymbol{F}_l^w . \boldsymbol{n}$	$\boldsymbol{F}_l^w . \boldsymbol{n}_{K,\sigma} + \boldsymbol{F}_g^w . \boldsymbol{n}_{K,\sigma}$
M12	$\rho_g^w \varphi S_g - (\rho_g^w \varphi S_g)^-$	0
FH12*	$\sum_{\delta K} \boldsymbol{F}_g^w . \boldsymbol{n}$	$\boldsymbol{F}_l^h . \boldsymbol{n}_{K,\sigma} + \boldsymbol{F}_g^h . \boldsymbol{n}_{K,\sigma}$
M21	$\rho_g^h \varphi S_l - (\rho_g^h \varphi S_g)^-$	0
FH21*	$\sum_{\delta K} \boldsymbol{F}_g^h . \boldsymbol{n}$	0
M22	$\rho_l^h \varphi S_l - (\rho_l^h \varphi S_l)^-$	0
FH22*	$\sum_{\delta K} \boldsymbol{F}_l^h . \boldsymbol{n}$	0

Tableau 4.2-1: Contraintes généralisées pour les schémas VFDA (*HH2SUDA)

4.3 Intégration

Comme en éléments finis, la boucle principale d'intégration se fait par élément. En revanche au sein d'un élément on bouclera sur les nœuds (il n'y a plus de notion de points d'intégration, mais juste des points d'approximation qui sont ici les nœuds). Ce schéma ayant ses nœuds au centre ainsi que sur chaque arête, cela permet ici implicitement de faire une boucle sur les interfaces. Finalement, la structure éléments finis n'est pas modifiée.

Au final on peut résumer l'intégration des différentes équations traitées dans le tableau suivant (écrit pour un quadrangle mais aisément généralisable) :

Support	Équation	Type
Face $\sigma 1$	$R_{\sigma 1}^w$	Continuité flux d'eau
	$R_{\sigma 1}^h$	Continuité flux de h
Face $\sigma 2$	$R_{\sigma 2}^w$	Continuité flux d'eau
	$R_{\sigma 2}^h$	Continuité flux de h
Face $\sigma 3$	$R_{\sigma 3}^w$	Continuité flux d'eau
	$R_{\sigma 3}^h$	Continuité flux de h
Face $\sigma 4$	$R_{\sigma 4}^w$	Continuité flux d'eau
	$R_{\sigma 4}^h$	Continuité flux de h
Centre K	R_K^w	Conservation de la masse de l'eau

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

	R_K^h	Conservation de la masse de h

4.4 Variables internes

Les variables internes sont ici :

Numéro	Nom de composante Aster	Contenu
1	*V1*	$\rho_{lq} - \rho_{lq}^0$
2	*V2*	$\varphi - \varphi^0$
3	*V3*	$p_{vp} - p_{vp}^0$
4	*V4*	S_{lq}
5	*V5*	P_c
6	*V6*	P_g

Remarque : on rappelle qu'ici les points de Gauss au sens Aster sont les nœuds de l'élément.

4.5 Validation

Le tableau suivant présente quelques exemples de cas tests de validation pour des problèmes physiques classiques :

Cas test	Phénomène	Modélisations testées
wtnp117	Rééquilibrage capillaire	D_PLAN_HH2SUDA (c)
wtnp120	Apparition/disparition de phase dans un barreau	D_PLAN_HH2SUDA (a) 3D_HH2SUDA (c)
wtnp121	Barreau saturé en eau soumis à un choc de pression	D_PLAN_HH2SUDA (a) 3D_HH2SUDA (e)
wtnp122	Barreau saturé en gaz soumis à un choc de pression	D_PLAN_HH2SUDA (a)
wtnp123	Injection de gaz autours d'une galerie	D_PLAN_HH2SUDA (a)
wtnp124	Test de Liakopoulos : drainage gravitaire d'une colonne d'eau	D_PLAN_HH2SUDA (a)

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

5 Bibliographie

[1] O. Angelini : « Étude des schémas numériques pour les écoulements diphasiques en milieux poreux déformables pour des maillages quelconques. Application au stockage des déchets radioactifs. Thèse d'Ophélie Angélini. » Note H-T64-2011-01146

[2] S. Granet : « Chantier numérique en THM dans Code_Aster » Note HT-64-2005-01621

[3] Eymard R., Gallouët, T., Herbin R. (2000) « Finite Volume Method », Handbook of Numerical Analysis, vol. VII, p. 713-1020. Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions.

[4] Eymard R., Gallouët, T., Herbin R. (2007) « A New Finite Volume Scheme fpr anisotropic diffusion problems on general grids : convergence analysis», C.R., Math, Acoad. Sci. Paris, vol 344, no. 6, pp.403-406.

[5] O. Coussy : « Mécanique des milieux poreux ». Éditions TECHNIP.

6 Description des versions du document

Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications
10/02/10	S.Granet EDF-R&D/AMA	Version initiale

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