Un Schéma volumes finis 3D pour un modèle d'écoulements "eau-gaz" en milieux poreux

B. Amaziane, M. Dymitrowska, **S. Tchouanmo**

Journées Scientifiques du GNR MoMaS
Université Lyon 1, 4-5 septembre 2008.

Plan de la présentation

- Conservation de la masse par phase $\alpha = w, g$

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} \rho_\alpha S_\alpha + div(\rho_\alpha \vec{q}_\alpha) = Q_\alpha.$$

- Loi de Darcy par phase

$$\vec{q}_\alpha = -\mathbf{K}(x)\lambda_\alpha(\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \vec{g}) \ , \ \ \lambda_\alpha = \frac{kr_\alpha}{\mu_\alpha}.$$

- Pression capillaire et saturation totale

$$P_c(S_w) = P_g - P_w \ \ , \ \ \ S_w + S_g = 1.$$

- Autres hypothèses
  - $\rho_w = \rho = cste$, $\rho_g = \sigma_g P_g$ (loi des gaz parfaits)
  - milieu poreux à un seul type de roche
  - système à l'équilibre thermodynamique

- Quelques fonctions de S et P

$$f_1 = \frac{\rho\lambda_w}{\rho\lambda_w + \sigma_g P \lambda_g} \;,\quad f_3 = \sigma_g P \lambda_g f_1 \;,\quad f_2 = (\rho - \sigma_g P) f_3$$

$$F_1 = (\rho - \sigma_g P) S + \sigma_g P \;,\quad F_2 = \rho^2 \lambda_w + \sigma_g^2 P^2 \lambda_g \;,\quad F_3 = \rho\lambda_w + \sigma_g P \lambda_g$$

- Flux total : $\vec{q} = \rho \vec{q}_w + \rho_g \vec{q}_g$
- Équation de la saturation d'eau

$$\phi\rho \frac{\partial}{\partial t} S + div(f_1 \vec{q}) + div(f_2 \mathbf{K} \vec{g}) - div(f_3 \mathbf{K} \nabla P_c(S)) = Q_w \qquad (1)$$

- Équation de la pression de gaz

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} F_1 + div(F_2 \mathbf{K} \vec{g}) - div(F_3 \mathbf{K} \nabla P) - div(\rho\lambda_w \mathbf{K} \nabla P_c(S)) = Q_t \quad (2)$$

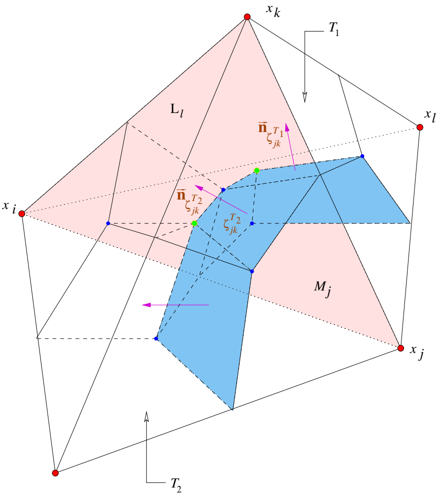
Termes du même type dans (1) et (2)

- f_1 : strictement monotone en S
- f_2 : changement de variation raide en $S = 1$
- diffusions non linéaires : $f_3 \nabla P_c$ et $F_3 \nabla P$
- couplage non linéaire : $\lambda_w \nabla P_c$

Schéma numérique

- En temps : euler implicite
- En espace : volumes finis vertex-centred
  - ⋆ diffusion : approche volumes finis-éléments finis P1 [1]
  - ⋆ convection : schéma de type Godunov généralisé [3]
- Méthode de Newton pour les non linéarités

Maillage primal de tétraèdres et dual de volumes de contrôles



- *noeuds des tétraèdres T_1 et T_2*
- *centres de gravité des tétraèdres*
- *centres des faces de tétraèdres*
- L_l *, face commune aux tétraèdres et opposée au noeud x_l*
- Γ_j *, bord du volume de controle M_j de centre x_j*
- *normales aux interfaces ζ de Γ_j*

Notations

- $\mathcal{T}_h = (T_i)_{i=0,..,Ne}$ maillage primal de $\bar{\Omega}$
- $\Sigma_h = (M_j)_{j=0,..,Ns}$ maillage dual
- n = indice de pas de temps , m = indice d'itération de Newton
- $\hat{S} = S^n$, $S^m = S^{n+1,m}$; $\hat{P} = P^n$, $P^m = P^{n+1,m}$
- Pour toute fonction γ, $(\gamma)^m = \gamma(S^m, P^m)$
- $\delta S^m = S^{m+1} - S^m$ et $\delta P^m = P^{m+1} - P^m$

Intégration sur un VC M_j : on pose $T_i = T$ puis

$$\sum_{T} = \sum_{\substack{T\in\mathcal{T}_h \\ T\cap M_j\neq\emptyset}} \quad , \quad \tilde{\sum_{\zeta_{jk}^T}} = \sum_{\substack{x_k\in\mathcal{N}(T) \\ k\neq j}} \quad , \quad \partial M_j \cap T = \bigcup_{\substack{x_k\in\mathcal{N}(T) \\ k\neq j}} \zeta_{jk}^T$$

Equation de la saturation d'eau

$$
\begin{aligned}
(S_j^{m+1} - \hat{S}) &+ \frac{\Delta t^n}{|M_j|\phi_j\rho} \sum_T \tilde{\sum_{\zeta_{jk}^T}} |\zeta_{jk}^T| \, (f_1)_{\zeta_{jk}^T}^{m+1} \, (\vec{q})_{\zeta_{jk}^T}^{m+1} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta_{jk}^T} \\
&+ \frac{\Delta t^n}{|M_j|\phi_j\rho} \sum_T \tilde{\sum_{\zeta_{jk}^T}} |\zeta_{jk}^T| \, (f_2)_{\zeta_{jk}^T}^{m+1} \mathbf{K}_{\zeta_{jk}^T} \, \vec{g} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta_{jk}^T} \\
&+ \frac{\Delta t^n}{|M_j|\phi_j\rho} \sum_T \tilde{\sum_{\zeta_{jk}^T}} |\zeta_{jk}^T| \, (f_3)_{\zeta_{jk}^T}^{m+1} \mathbf{K}_{\zeta_{jk}^T} \nabla P_c(S^{m+1})_{\zeta_{jk}^T} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta_{jk}^T} \\
&= \frac{\Delta t^n}{\phi_j \rho} Q_{w,j}
\end{aligned}
$$

Convection 1 : $(f_1)^{m+1}_{\zeta^T_{jk}} \times \vec{q}^{\,m+1}_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}$

- linéarisation de Newton : au premier ordre, on a

  $$(f_1)^{m+1} \simeq (f_1)^m + \delta S^m (\partial_S f_1)^m + \delta P^m (\partial_P f_1)^m$$

  et

  $$\vec{q}^{\,m+1}_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}} \simeq [\vec{q}^{\,m}_{\zeta^T_{jk}} + (\delta S^m)_{\zeta^T_{jk}} (\partial_S \vec{q})^m_{\zeta^T_{jk}} + (\delta P^m)_{\zeta^T_{jk}} (\partial_P \vec{q})^m_{\zeta^T_{jk}}] \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}$$

  Choix d'une moyenne arithmétique pour $(\delta S^m)_{\zeta^T_{jk}}$ et $(\delta P^m)_{\zeta^T_{jk}}$

- choix du décentrement
  f_1 monotone : on décentre suivant le signe de $\vec{q}^{\,m}_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}$

  $$(f_1)^m_{\zeta^T_{jk}} = \begin{cases} (f_1)^m_j & \text{si } \vec{q}^{\,m}_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}} \geq 0 \\ (f_1)^m_k & \text{si } \vec{q}^{\,m}_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}} < 0 \end{cases}$$

Convection 2 : $(f_2)^{m+1}_{\zeta^T_{jk}} \left(\mathbf{K}_{\zeta^T_{jk}}\, \vec{g} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}\right)$

- f_2 admet un extrémum local en S^* : soit Λ définie par

$$\Lambda(a_1, a_2, P) = \begin{cases} f_2(a_1, P) & \text{si } \; a_2, a_1 \leq S^* \\ f_2(a_2, P) & \text{si } \; a_2, a_1 \geq S^* \\ f_2(S^*, P) & \text{si } \; a_2 \leq S^* \leq a_1 \\ min\left\{f_2(a_1, P), f_2(a_2, P)\right\} & \text{si } \; a_1 \leq S^* \leq a_2 \end{cases}$$

- on décentre Λ suivant le signe de $\vec{g} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta_{jk}}$

$$\begin{aligned} (f_2)^{m+1}_{\zeta^T_{jk}} \left(\mathbf{K}_{\zeta^T_{jk}}\, \vec{g} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}\right) &= \Lambda(S_j^{m+1}, S_k^{m+1}, P^{m+1}_{\zeta^T_{jk}}) \left(\mathbf{K}_{\zeta^T_{jk}}\, \vec{g} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}\right)^+ \\ &+ \Lambda(S_k^{m+1}, S_j^{m+1}, P^{m+1}_{\zeta^T_{jk}}) \left(\mathbf{K}_{\zeta^T_{jk}}\, \vec{g} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}\right)^- \end{aligned}$$

Flux diffusif : $(f_3)^{m+1}_{\zeta^T_{jk}} \mathbf{K}_{\zeta^T_{jk}} \nabla P_c(S^{m+1})_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}$

$$\sum_T \tilde{\sum_{\zeta^T_{jk}}} |\zeta^T_{jk}| \, (f_3)^{m+1}_{\zeta^T_{jk}} \mathbf{K}_{\zeta^T_{jk}} \nabla P_c(S^{m+1})_{\zeta^T_{jk}} \cdot \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}$$

$$= \quad \sum_T (f_3)^{m+1}_T \nabla P_c(S^{m+1})_T \cdot \mathbf{K}_T \tilde{\sum_{\zeta^T_{jk}}} |\zeta^T_{jk}| \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}}$$

φ_j fonction de base au nœud x_j, $\forall T / T \cap M_j \neq \emptyset$, on a :

$$\tilde{\sum_{\zeta^T_{jk}}} |\zeta^T_{jk}| \vec{\mathbf{n}}_{\zeta^T_{jk}} = \frac{|L_j|}{3} \, \vec{\mathbf{n}}_{T,j} \quad \text{et} \quad \nabla \varphi_j | T = -\frac{|L_j|}{3\,|T|} \, \vec{\mathbf{n}}_{T,j}$$

avec L_j face opposée au noeud x_j et $\vec{\mathbf{n}}_{T,j}$ sa normale sortante.

Ainsi, $\nabla P_c(S^{m+1})_T = \sum_{\substack{x_k \in \mathcal{N}(T) \\ k \neq j}} \left(P_c(S^{m+1}_k) - P_c(S^{m+1}_j) \right) \nabla \varphi_k$

- on approche $(f_3)_T^{m+1}$ par une moyenne arithmétique :

$$(f_3)_T^{m+1} = \frac{1}{4} \sum_{x_\alpha \in \mathcal{N}(T)} (f_3)_\alpha^{m+1}$$

- on linéarise $(f_3)^{m+1}$ et $P_c(S^{m+1})$

- on pose : $\mathfrak{D}_{j,k}^T = -\frac{|T|}{|\varsigma_{jk}^T|} \mathfrak{s}_{jk} \nabla\varphi_k \cdot \mathbf{K}_T \nabla\varphi_j$

  et $\mathfrak{s}_{jk}$ la distance entre les noeuds x_j et x_k

- on déduit le terme de diffusion en fonction de :

  δS_j^m , δP_j^m et δS_k^m , δP_k^m , $k \neq j$

La discrétisation de l'équation en pression de gaz est similaire

- Le système linéaire couplé à résoudre

$$\begin{bmatrix} \mathcal{M}^{1,1} & \mathcal{M}^{1,2} \\ \mathcal{M}^{2,1} & \mathcal{M}^{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta S^m \\ \delta P^m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{S}^1 \\ \mathcal{S}^2 \end{bmatrix} \tag{3}$$

- Un choix de découplage :
  Calculer P^{m+1} sachant S^m puis S^{m+1} avec P^{m+1}
  - ⋆ soit externe à l'algorithme de Newton
  - ⋆ soit interne à l'algorithme de Newton

Alors on résout (2) puis (1)

Environnement

LibMesh - A parallel adaptive C++ Finite Element Library
http ://libmesh.sourceforge.net/

- Mailleurs : Gmsh, Mefisto, TetGen *etc*.
- Éléments finis : Lagrange, Hermite, discontinu $P0$
- Méthodes non linéaires : `Class NewtonSolver`
- Solveurs importables : LASPack, PETSc, METIS *etc*.
- Post-processing : VTK, Tecplot *etc*.

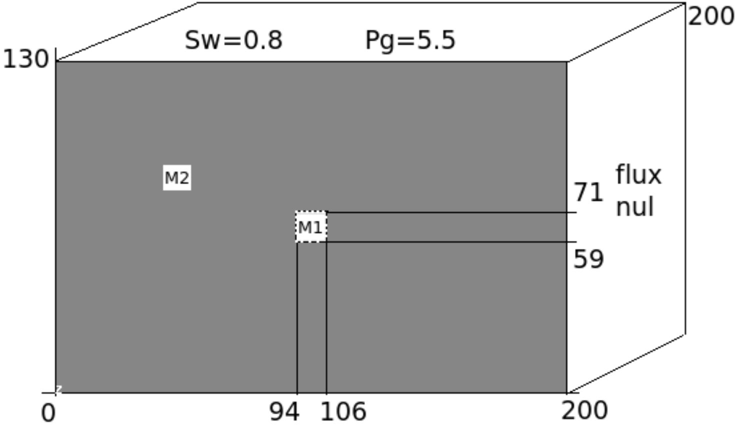
Choix

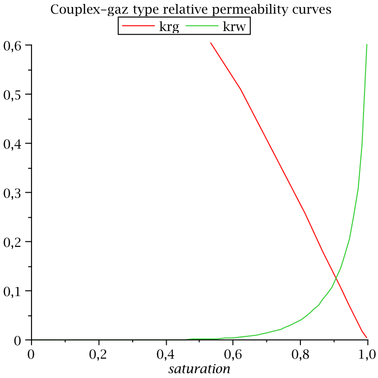
- Mailleur TetGen : maillage de tétraèdres non structurés et conformes de type Delaunay
- Volumes finis vertex-centred intégrés
- Algorithme de Newton classique
- Solveur linéaire *GMRES* préconditionné $ILU0$
- Format de sortie VTK

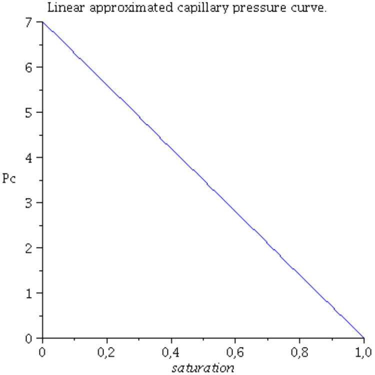
Un cas test en milieu homogène isotrope

Conditions initiales

$S_w = 0.5$ dans M_1, $S_w = 0.8$ dans M_2, $P_g = 5.5$, $\mathbf{K} = 1.10^{-16}$







- On injecte du gaz via le terme source dans M_1 : $Q_g = 1000 mol/an$
- On néglige la gravité

Evolution de la saturation d'eau au coeur du cube

Fig.: Gauche : saturation d'eau à $t = 1$ ans ; min-max : [0.57, 0.8]

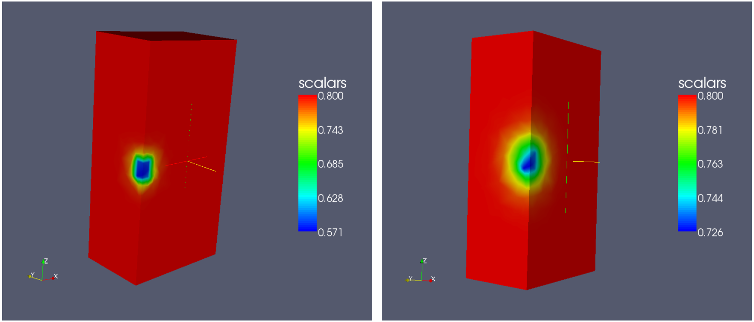
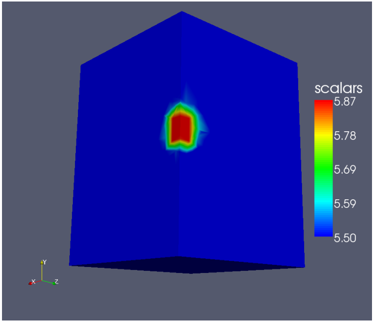


Fig.: Droite : saturation d'eau à $t = 5$ ans ; min-max : [0.72, 0.8]

Evolution de la pression de gaz au coeur du cube

Fig.: Gauche : Pression de gaz à t = 1 ans



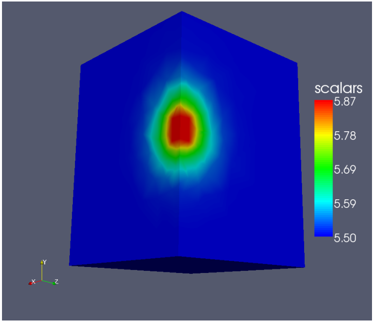


Fig.: Droite : Pression de gaz à t = 5 ans

- Achever l'implémentation du schéma et le valider sur le benchmark "Couplex-Gaz" [2]
- Trouver une stratégie pour le choix du pas de temps
- Utilisation de moyens de calcul intensif pour les cas réels
- Étude théorique du schéma

⋆ existence et unicité d'une solution du problème discrétisé ?

⋆ stabilité et convergence du schéma ?

difficultés

- ⋆ équations dégénérées et couplées
- ⋆ hypothèses optimales sur le maillage pour avoir le principe du maximum : la condition de Delaunay est insuffisante en 3D [4, 5]

Bibliographie

B. Amaziane, M. Dymitrowska, M. El Ossmani, and C. Serres.
A vertex-centred finite volume method for immiscible compressible two-phase flow in heterogeneous porous media.
Submitted 2008.

ANDRA.
Cas Test Couplex-Gaz 2 : Modélisation 3D d'une zone de stockage de déchets vitrifiés.
http ://www.andra.fr/IMG/pdf/Cas_test2.pdf, 2006.

R. Eymard, T. Gallouët, M. Ghilani, and R. Herbin.
Error estimates for the approximate solutions of a nonlinear hyperbolic equation given by finite volume schemes.
IMA Journal of Numerical Analysis, 18(4) :563–594, 1998.

Franck W. Letniowski.
Three-dimensional delaunay triangulations for finite element approximations to a second-order diffusion operator.
SIAM J. Sci. Stat. Comput., 13(3) :765–770, May 1992.

F.W. Letniowski and P.A. Forsyth.
A control volume finite element method for three-dimensional napl groundwater contamination.
International journal for numerical methods in fluids, 13 :955–970, 1991.